

IV. Inelastische Neutronenstreuung a) Phononen

I. Wechselwirkung und Streugesetze

II. Experimentelle Methoden

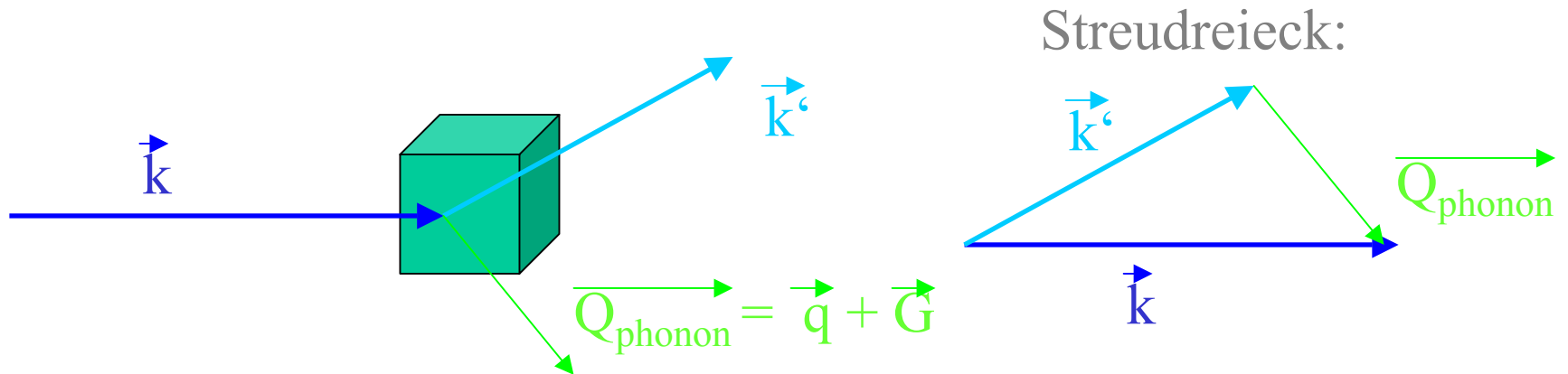
III. Gitterdynamik in einfachen Systemen

IV. Model-Rechnungen

V. Strukturelle Phasenübergänge und Soft-Mode-Verhalten

VI. Elektron-Phonon-Kopplung

I. Wechselwirkung und Streugesetze



Impuls : $\vec{Q} = \vec{k} - \vec{k}'$

$$E = \frac{\hbar^2 \cdot k^2}{2 \cdot m}$$

Energie : $E = E' + E_{\text{Phonon}}$

$$E_{\text{Phonon}} = \hbar \cdot \omega = \frac{\hbar^2}{2 \cdot m} \cdot (k^2 - k'^2)$$

Spin : Gesamt - Spin vorher = nachher

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}$$

$$= (k'/k)(m/2\pi)^2 \sum_{\lambda_i, \sigma_i} P_{\lambda_i} P_{\sigma_i} \sum_{\lambda', \sigma'}$$

$$| \langle \sigma' \lambda' | \int d^3r \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{r}) \hat{V}(r) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) | \sigma_i \lambda_i \rangle |^2$$

$$* \delta(\omega + E' - E)$$

Endzustände

Anfangszustände

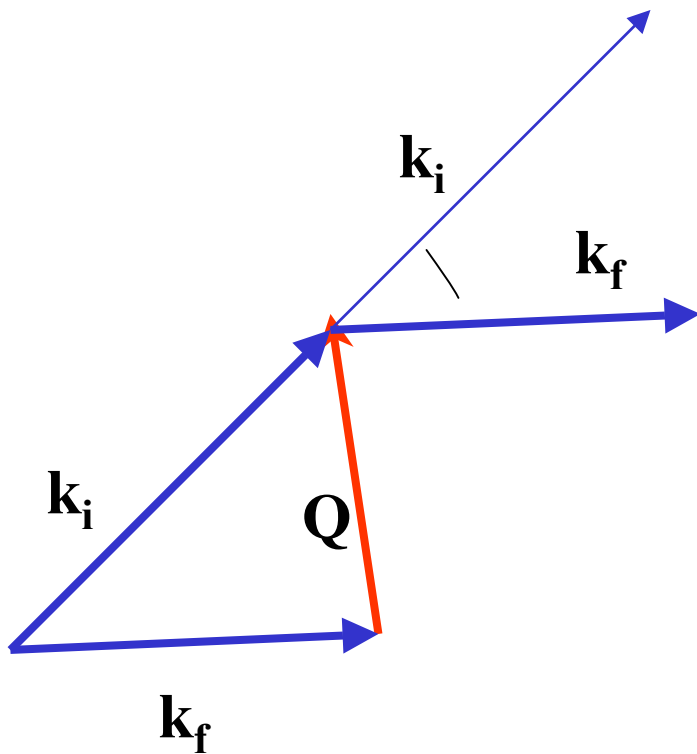
Energieerhaltung

Wechselwirkung

Born Näherung :

- zur Berechnung der der Streuintensität, benötigt :
Wechselwirkung plus Zustände
- andere Richtung : gemessenes $I(Q, \omega)$ und $V(r)$ bekannt
 → Bestimmung der Zustände λ (hier Phononen)
dies ist das Ziel der meisten Streuexperimente

Streuung an einem Phonon

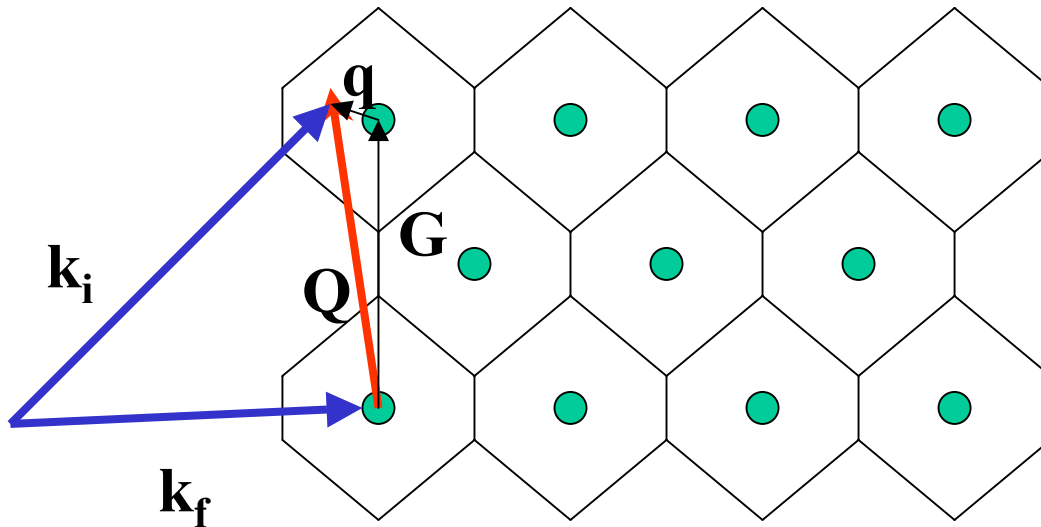


Streuung an einem Phonon

Anregung eines Phonons bei Streuvektor Q

$$\mathbf{k}_i = \mathbf{k}_f + \mathbf{Q} \quad E_i = E_f + E_{\text{phonon}}$$

$$\text{Zerlegung} \quad \mathbf{Q} = \mathbf{G} + \mathbf{q}$$



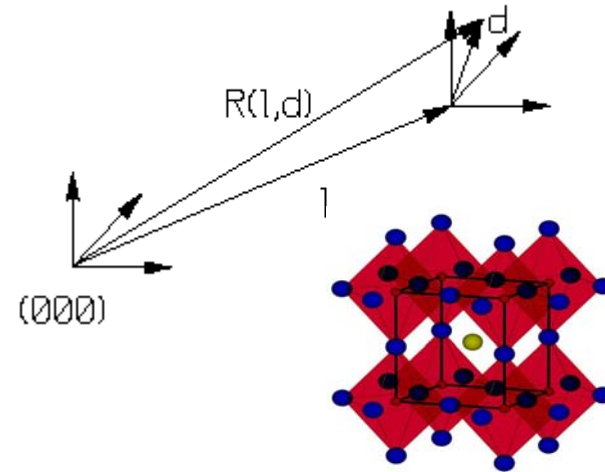
Beschreibung der Gitterdynamik in harmonischer Näherung

ein Atom sitzt im Kristall bei :

$$\underline{R}_{\underline{l},\underline{d}} = \underline{l} + \underline{d} + \underline{u}(\underline{l}, \underline{d})$$

Gleichgewichtsposition

Verschiebung



- hier nur 1 Atom : **Harmonische Näherung** : $\Phi(\underline{l}, \underline{l}')$ nur Terme zweiter Ordnung

$$D_{\alpha,\beta}(\underline{l}, \underline{l}') = \frac{d^2 \Phi(\underline{l}, \underline{l}')}{d u_{\alpha}(\underline{l}) d u_{\beta}(\underline{l}')}$$

zweite Ableitungen des Potentials

Bewegungsgleichungen :

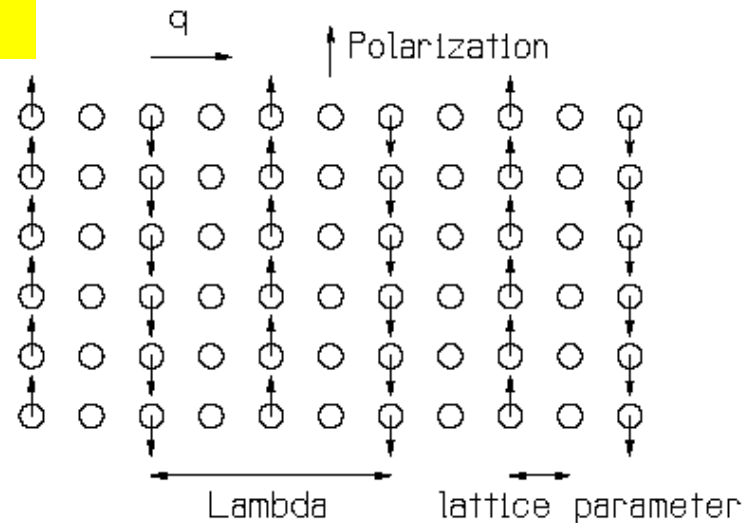
$$M \ddot{u}_{\alpha}(\underline{l}) = - \sum_{\beta, \underline{l}'} D_{\alpha,\beta}(\underline{l}, \underline{l}') u_{\beta}(\underline{l}') \quad \text{mit } D_{\alpha,\beta}(\underline{l}, \underline{l}') \text{ den Kraftkonstanten}$$

ABER : es gibt 3N Gleichungen !!!!

Ansatz : ebene Wellen

$$u_{\alpha}(\underline{l}) = \underbrace{e_{\alpha}}_{\text{Polarisierung}} M^{-1/2} \cdot \exp(i\underbrace{q\underline{l}}_{\text{Wellen-Vektor}} - \underbrace{\omega_0 t}_{\text{Frequenz}})$$

$$\omega_0^2 e_{\alpha} = 1/M \sum_{\underline{l}, \beta} D_{\alpha, \beta}(\underline{l}, 0) \exp(-i\underline{q\underline{l}})$$



- für jeden der N ($\sim 10^{23}$) möglichen q -Werte, gibt es 3 Gleichungen!

$$\bar{D}_{\alpha, \beta}(\underline{q}) = 1/M \sum_{\underline{l}, \beta} D_{\alpha, \beta}(\underline{l}, 0) \exp(-i\underline{q\underline{l}})$$

$$\omega_0^2 \underline{e} = \bar{D} \cdot \underline{e}$$

Standard Eigenwert-Problem
 \rightarrow 3 Lösungen $\omega_j(q)$ und $e_j(q)$

$$\bar{D}_{\alpha,\beta}(\underline{q}) = 1/M \sum_{\underline{l},\beta} D_{\alpha,\beta}(\underline{l}, 0) \exp(-i\underline{q}\underline{l}) \quad \text{ist die dynamische Matrix}$$

- erlaubt die Berechnung der Streuintensitäten (Quantenmechanik)

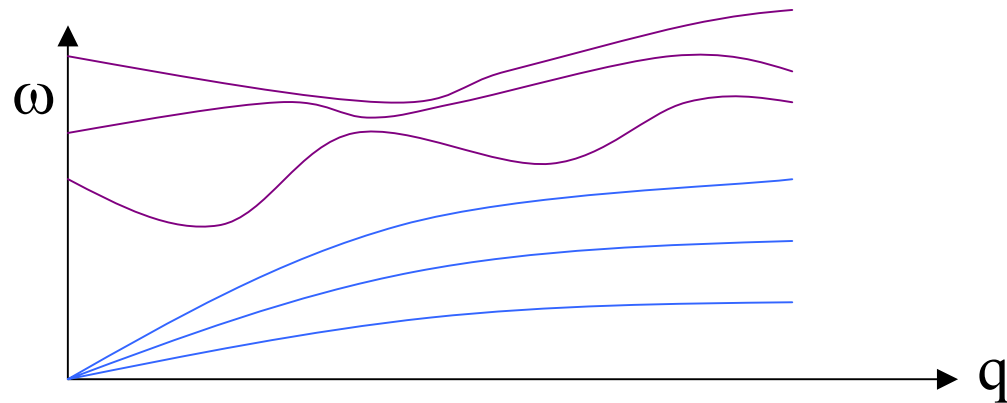
allgemeiner Fall : r Atome in der primitiven Zelle

$3r$ Moden zu jedem \mathbf{q}

$\mathbf{e}(\mathbf{q})$ Polarizationsvektor $3r$ -dimensional

$\mathbf{D}(\mathbf{q})$ dynamische Matrix ist $3r \times 3r$ -dimensional

Phononendispersion : \mathbf{q} -Abhängigkeit von ω



N erlaubte \mathbf{q} -Werte !!!!

Ein-Phononen-Streuquerschnitt

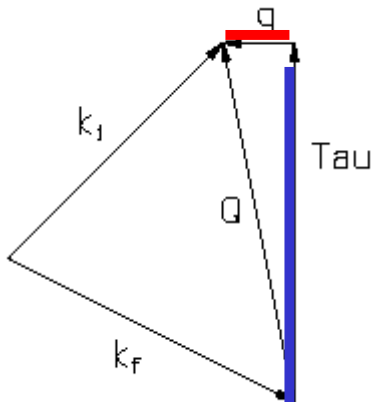
$$\left(\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE'}\right)^\pm = (k'/k) \frac{(2\pi)^3}{2v_0} \sum_{\underline{\tau}} \sum_{j, \underline{q}} |G_j(\underline{q}, \underline{Q})|^2 \quad \text{dynam. Strukturfaktor}$$

$$\cdot \frac{1}{\omega_j(\underline{q})} \quad \text{1/Energie-Term}$$

$$\cdot (n(\omega_j(\underline{q})) + 1/2 \pm 1/2) \quad \text{Bose-Faktor}$$

$$\cdot \delta(\omega \mp \omega_j(\underline{q})) \cdot \delta(\underline{Q} \mp \underline{q} - \underline{\tau})$$

Energie und Impuls Erhaltung



Streudreieck

Bose-Faktor

$$n(\omega_j(\underline{q})) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_j(\underline{q})}{kT}\right) - 1}$$

verschwindet für $T \rightarrow 0$

nähert sich $(kT/\hbar\omega)$ bei hohen T

Dynamischer Struktur-Faktor

$$G_j(\underline{q}, \underline{Q}) = \sum_d \frac{b_d}{\sqrt{m_d}} \cdot \exp(-W_d(\underline{Q}) + i\underline{Q} \cdot \underline{d}_d) \cdot (\underline{Q} \cdot \underline{e}_d^j(\underline{q}))$$

Summer über die Atome

Interferenzterm mit Debye-Waller *

Polarisationsterm **
nur **Q** parallel **e** !!!

- * und ** nicht trennbar: volle Rechnung notwendig
- Beispiel: longitudinale Mode in [100]-Richtung :
 - ** (h00) sind optimale Q-Werte
 - * für kleine q : (h00) sollte starker Bragg-Punkt sein

II Experimentelle Methoden

A) 3-Achsen-Spektrometer

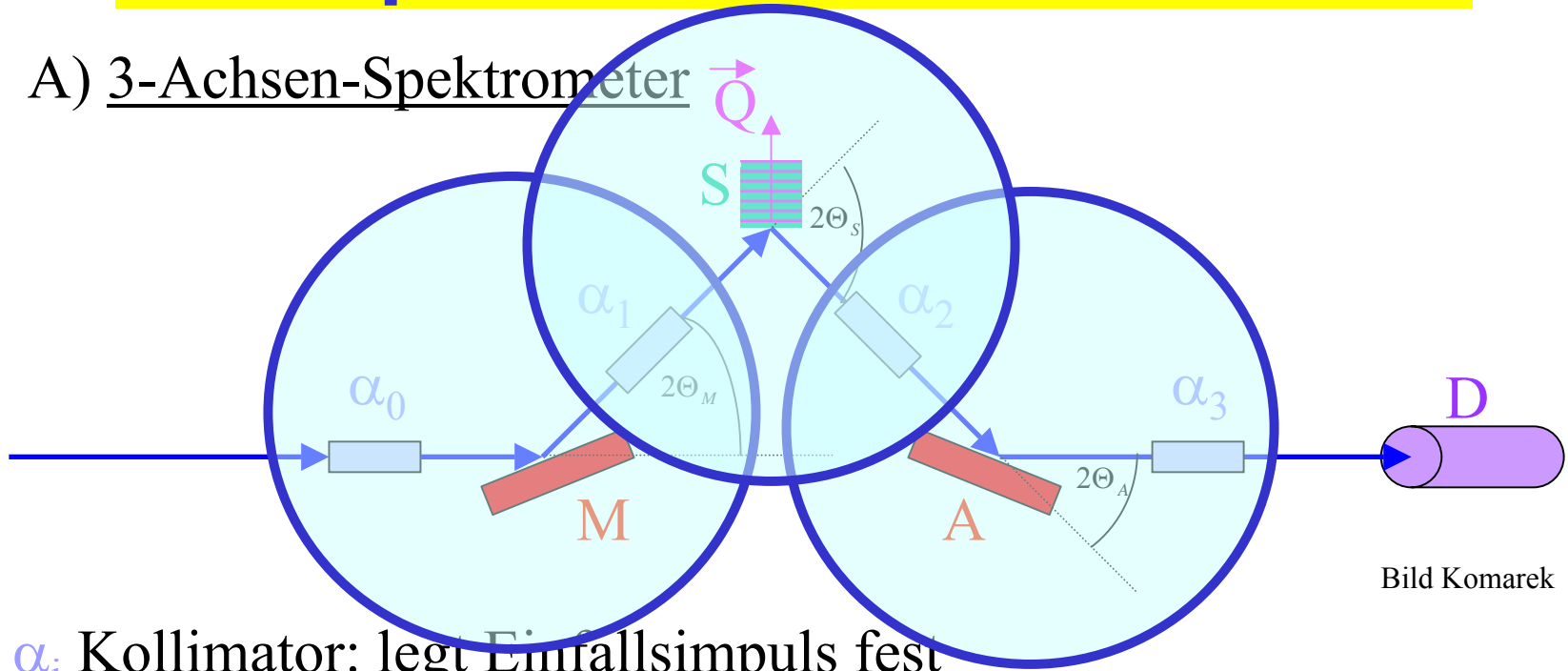


Bild Komarek

α_i Kollimator: legt Einfallsimpuls fest

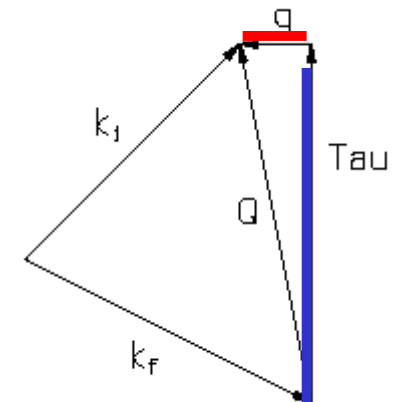
M Monochromator: Energie

S Probe $\rightarrow Q$

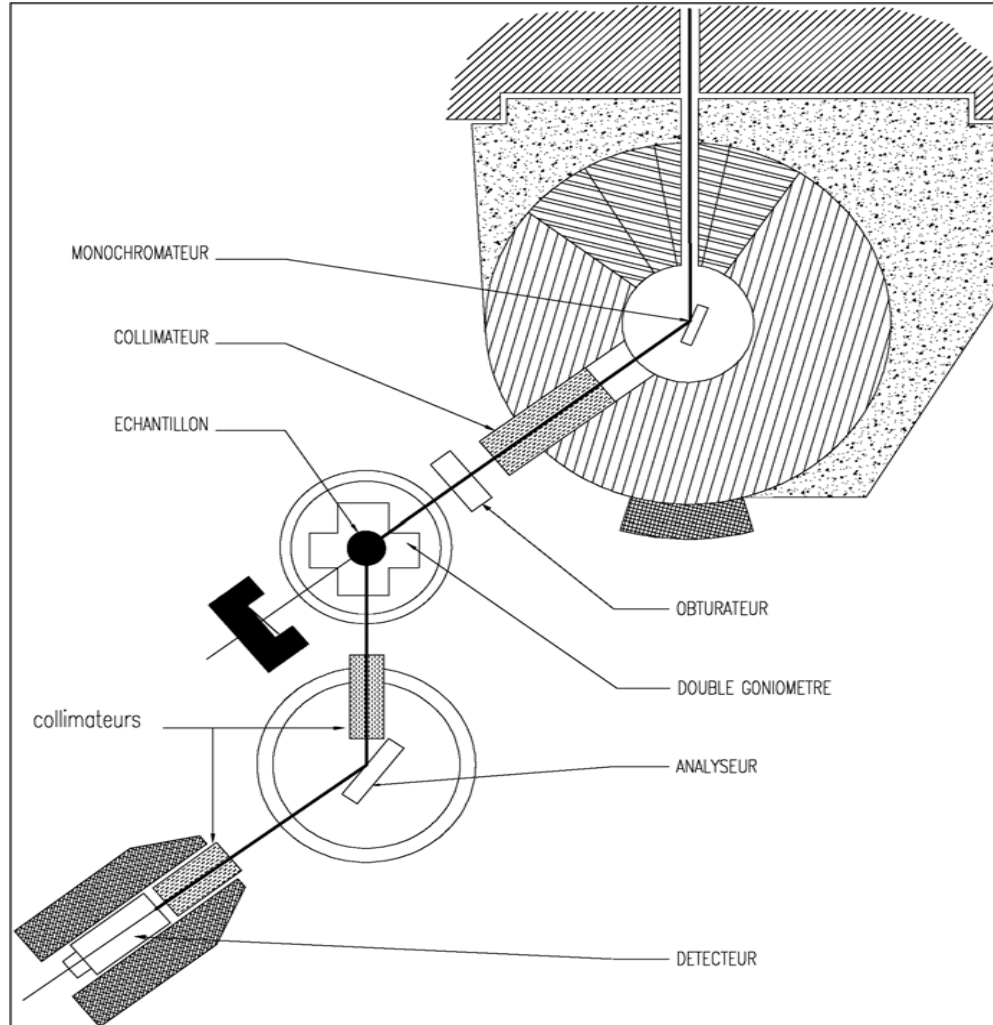
A Analysator: Endimpuls

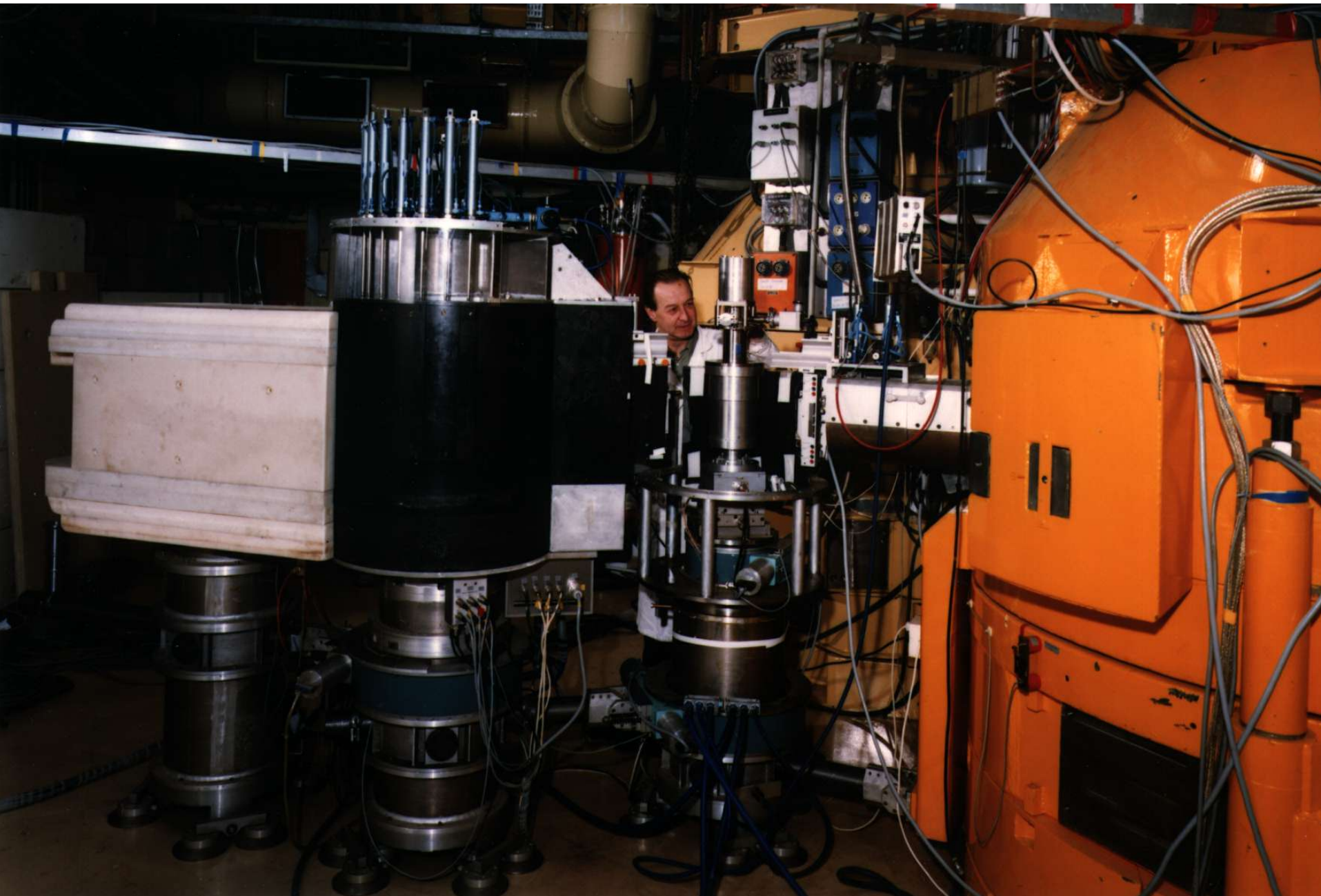
\vec{k}

\vec{k}'

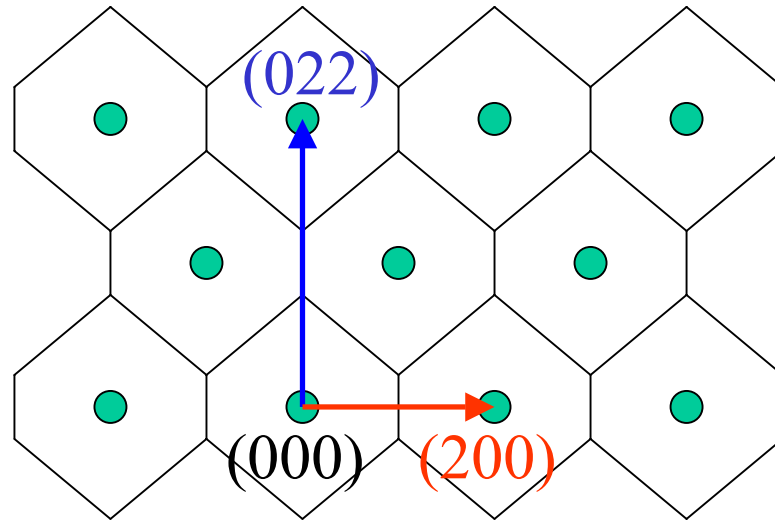


Streudreieck





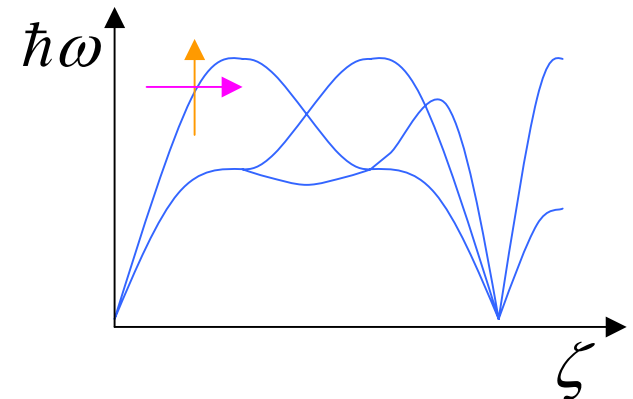
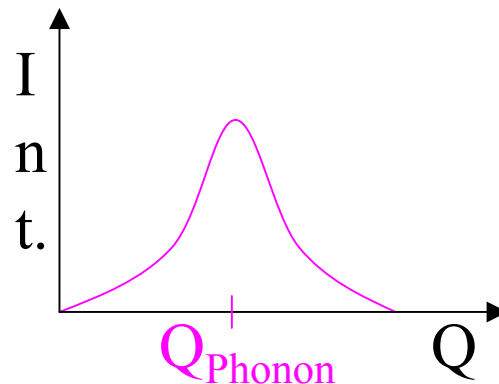
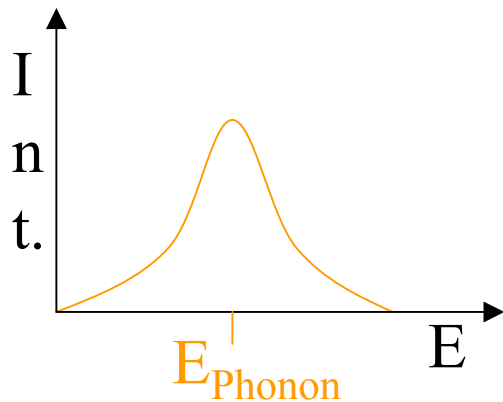
Reziproker Raum von Neon



Wie bestimmt man einen Punkt auf der Phononendispersion ?

Q-konstant : E variabel

E-konstant : Q variabel



Prinzipielle Arbeitsweise :

3-Achsenspektrometer

-Einstellen von k_i , k_f und $Q \rightarrow S(Q,E)$
aber endliches Integrationsvolumen

alle Auflösungen in Q und E sind gaussisch

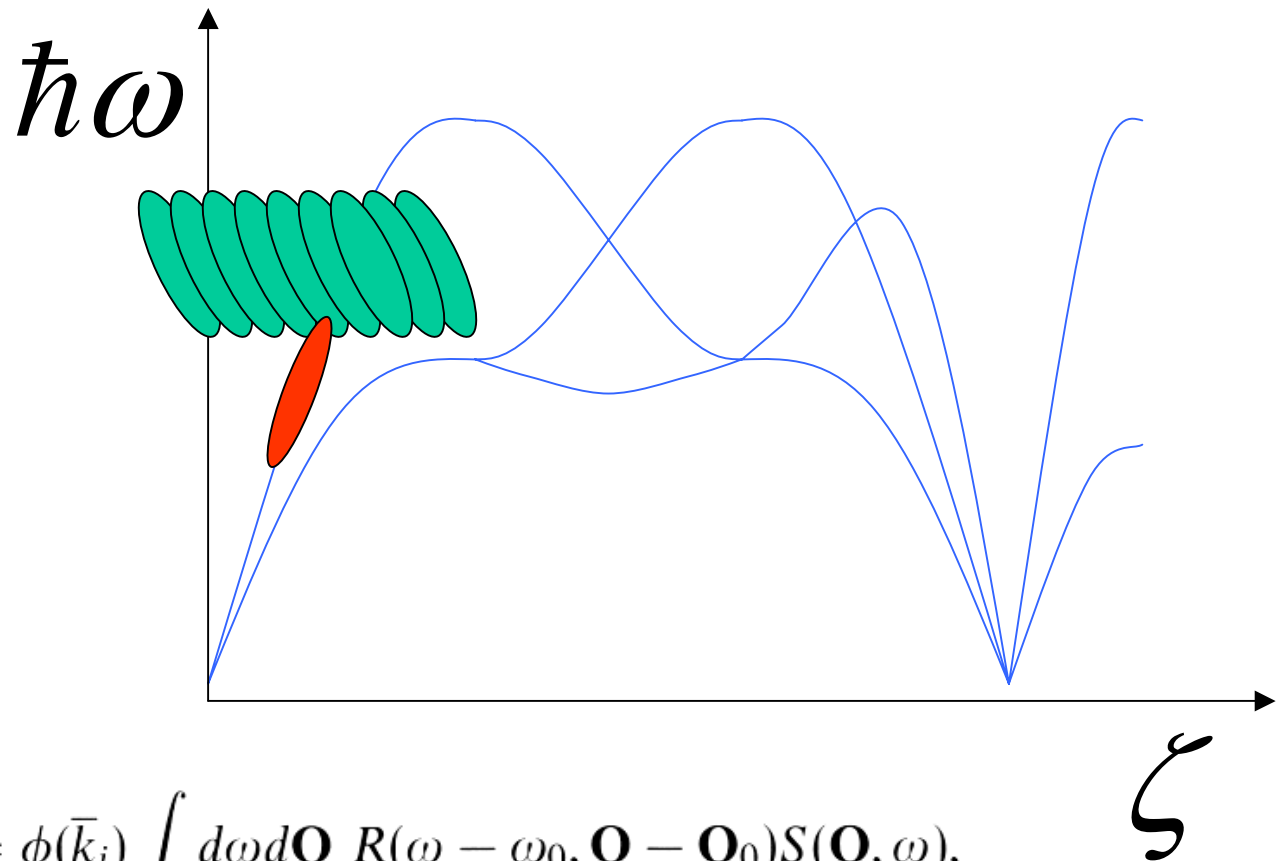
$$R(\omega - \omega_0, \mathbf{Q} - \mathbf{Q}_0) = R_0 \exp\left(-\frac{1}{2}\Delta\mathcal{Q}M\Delta\mathcal{Q}\right),$$

where

$$\Delta\mathcal{Q} \approx \left(\frac{m_n}{\hbar Q_0} (\omega - \omega_0), Q_{\parallel} - Q_0, Q_{\perp}, Q_z \right),$$

- Integration im vierdimensionalen Raum (Q,E)

Prinzipielle Arbeitsweise : 3-Achsenspektrometer



$$F_d(\omega_0, \mathbf{Q}_0) = \phi(\bar{k}_i) \int d\omega d\mathbf{Q} R(\omega - \omega_0, \mathbf{Q} - \mathbf{Q}_0) S(\mathbf{Q}, \omega),$$

Auflösung eines 3-Achsenpektrometer

-generell : Kompromiss hohe Auflösung \Leftrightarrow Intensität

Beispiel : Strahldivergenzen größer

→ mehr Neutronen passieren

ABER Q schlechter definiert

Wie kann man am effektivsten die Auflösung verbessern?

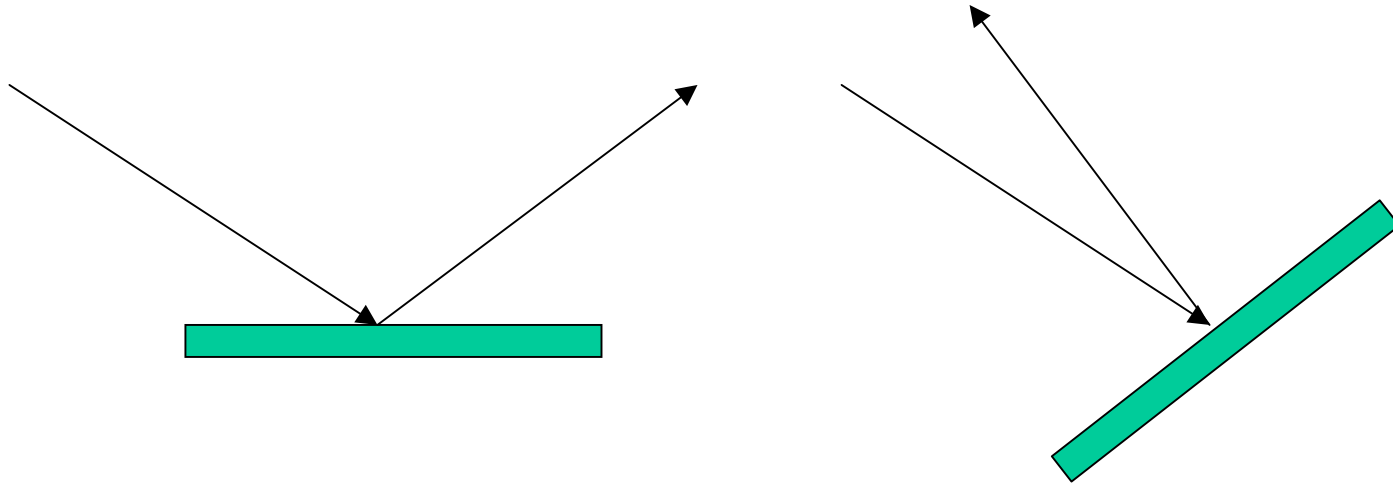
Schlagwort : Symmetrie ; Gleichmäßigkeit

Einsetzen von Kollimatoren → Abschneidung

besser Verwendung von Monochromatoren

mit kleinerem d-Wert (oder höher indiziert)

Monochromatoren



Faustformel : höhere Streuwinkel \rightarrow bessere Auflösung

- a) höhere Auflösung \Leftrightarrow höhere Indizierung
- b) Arbeiten mit kürzeren Wellenlängen
(kalte Neutronen)

Monochromatoren

Table 3.1. *Some important properties of materials that are (or have been) used for neutron monochromator crystals. The last column is the ratio of the incoherent to the total scattering cross section.*

Material	Structure	Lattice parameter		(hkl)	F/v_0 (10^{11} cm^{-2})	G_{hkl} (\AA^{-1})	$\sigma_{\text{inc}}/\sigma_{\text{scat}}$ (%)
		a (\AA)	c (\AA)				
Beryllium	hcp	2.2854	3.5807	(002)	0.962	3.5095	0.02
				(110)	0.962	5.4985	
Iron	bcc	2.86645		(110)	0.802	3.1000	3.4
Zinc	hcp	2.6589	4.9349	(002)	0.376	2.5464	1.9
PG ^a	layer	2.4612	6.7079	(002)	0.734	1.8734	0.02
				(004)	0.734	3.7467	
Niobium	bcc	3.3008		(200)	0.392	3.8071	0.04
Nickel (⁵⁸ Ni)	fcc	3.52394		(220)	1.316	5.0431	0
Copper	fcc	3.61509		(220)	0.653	4.9159	6.8
Aluminum	fcc	4.04964		(220)	0.208	4.3884	0.55
Lead	fcc	4.9505		(220)	0.310	3.5898	0.03
Silicon	diamond	5.43072		(111)	0.147	2.0039	0.2
				(220)	0.207	3.2724	
				(311)	0.147	3.8372	
Germanium	diamond	5.65776		(111)	0.256	1.9235	2.1
				(220)	0.362	3.1411	
				(311)	0.256	3.6832	

^a PG = pyrolytic graphite.

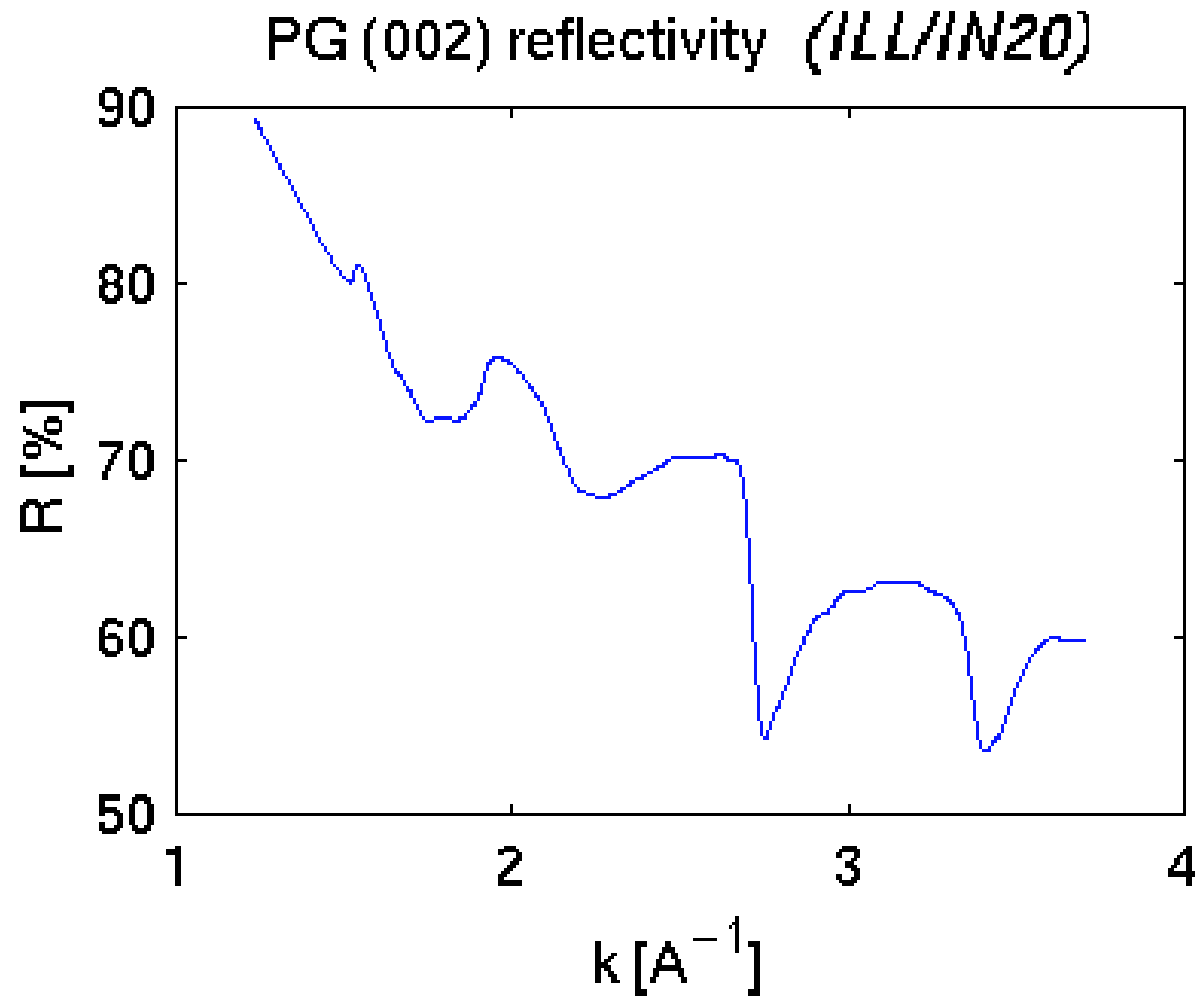
Monochromatoren

Table 3.2. *The performance at $\lambda = 1.27 \text{ \AA}$ of different monochromators (Riste and Otnes, 1969). PG stands for pyrolytic graphite.*

Crystal	Reflection	η ($'$)	\mathcal{R}_θ ($'$)	\mathcal{R}_θ/η	\mathcal{R}_λ (0.01 \AA)	\mathcal{R}_p
Be	002	22	11	0.5	1.1	0.42
Cu	111	22	4.7	0.19	0.53	0.14
Zn	002	34	13.6	0.39	1.9	0.31
Ge	111	18	4.8	0.27	0.9	0.22
PG	002	68	58	0.86	8.7	0.74

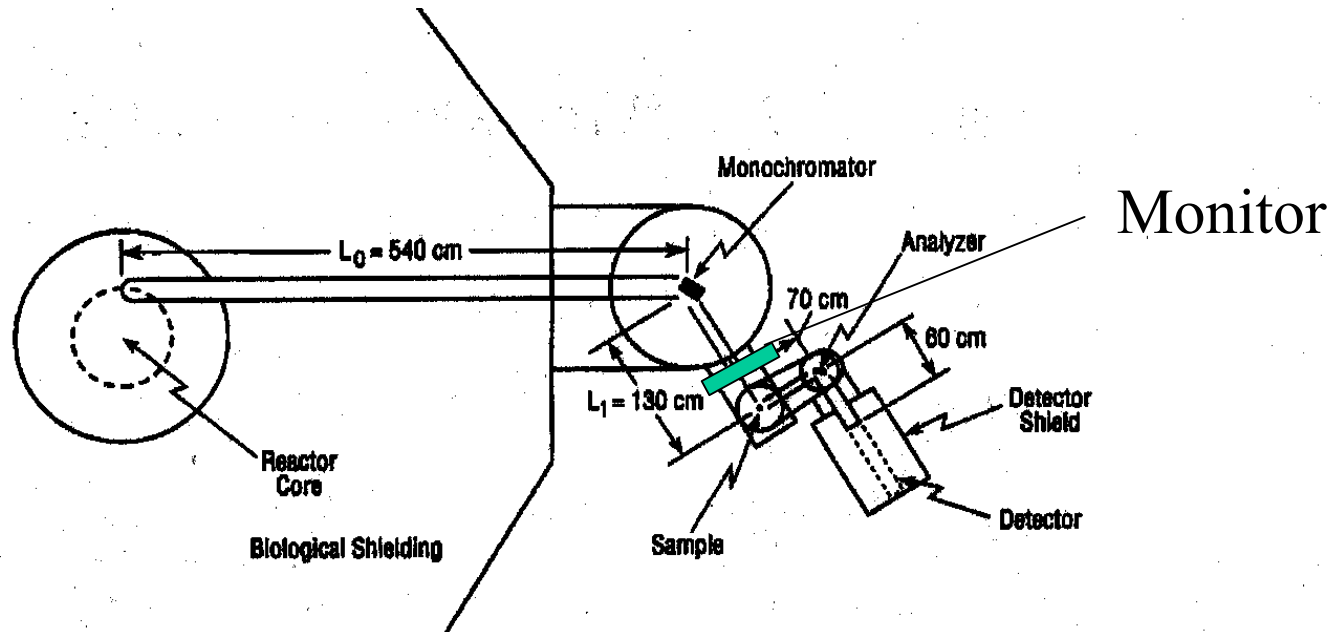
- pyrolithischer Grafit ist mit Abstand am besten ! ! !

PG-Monochromator



Constant Q-Scan

- Frage : Was hält man fest E_i oder E_f
- mit Änderung der Energie (i oder f) ändert sich die entsprechende Auflösung, Reflektivität
- man hält besser E_f fest , denn
Monitor korrigiert Änderung der Monochromatorreflektivität



Constant Q-Scan

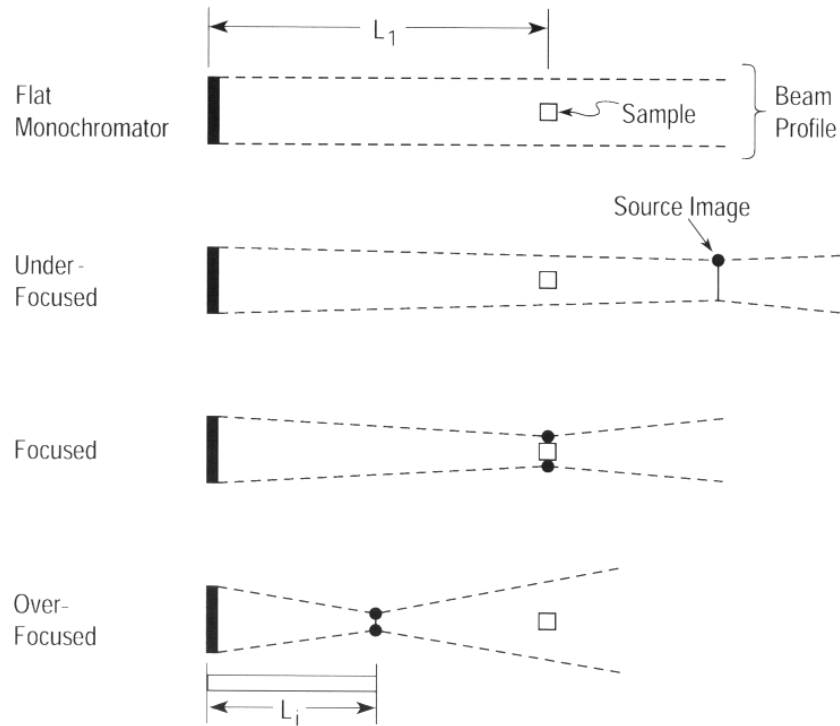
- Abhängigkeit des Phasenraums des Analysators
(Integrationsvolumen, Reflektivität)

$$V_f = \frac{\bar{k}_f^3}{\tan \theta_A} R_A(\bar{k}_f) V_f'$$



- k_f^3 -Term : kleine Endenergien kosten viel Intensität
(aber bringen Auflösung!)

Fokussierung - Krümmung



$$\frac{1}{L_0} + \frac{1}{L_i} = \frac{2 \sin \theta_M}{R}$$

Krümmungsradius variabel

Fig. 3.5. Beam profile as a function of degree of focusing. Diagrams represent from top to bottom $R = \infty$ (flat monochromator), R greater than focusing value, R satisfying focusing condition, and R less than focusing value (from Nunes and Shirane, 1971).

- fokussierende Monochromatoren : vertikal oder vertikal plus horizontal
- Analysatoren : horizontal (da Detektor längs)

Fokussierung intrinsisch

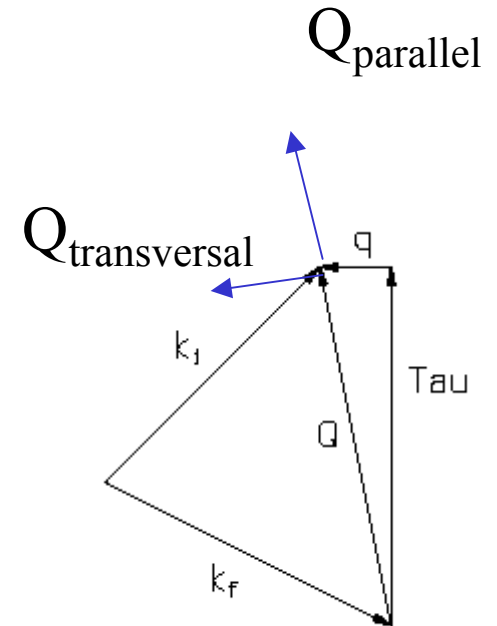
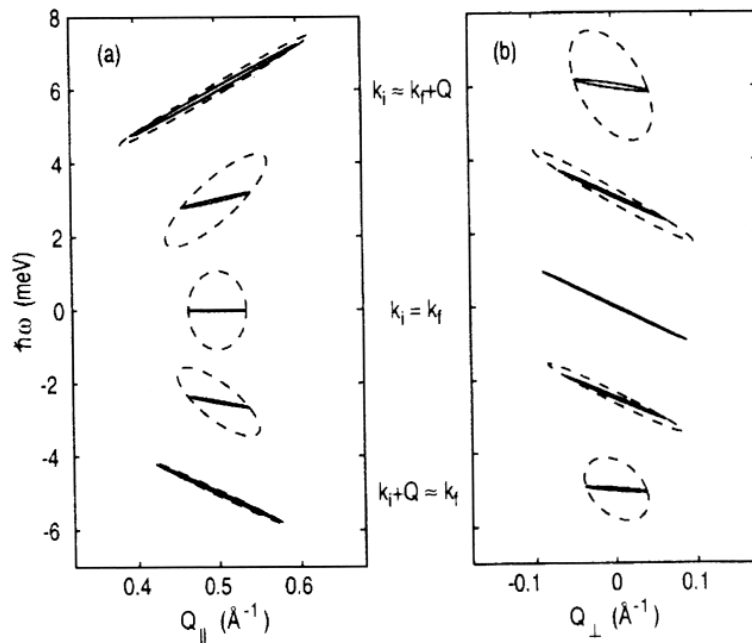
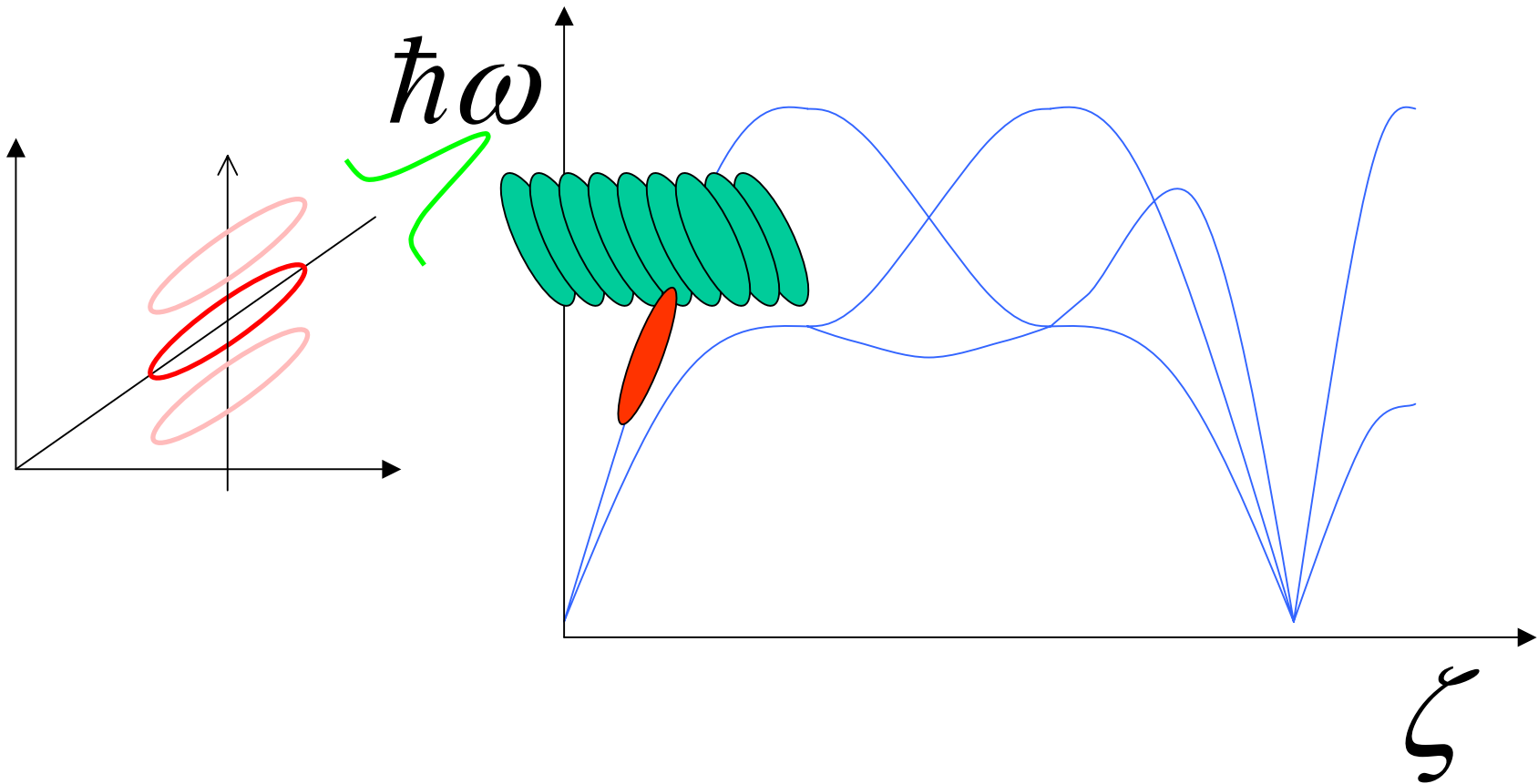


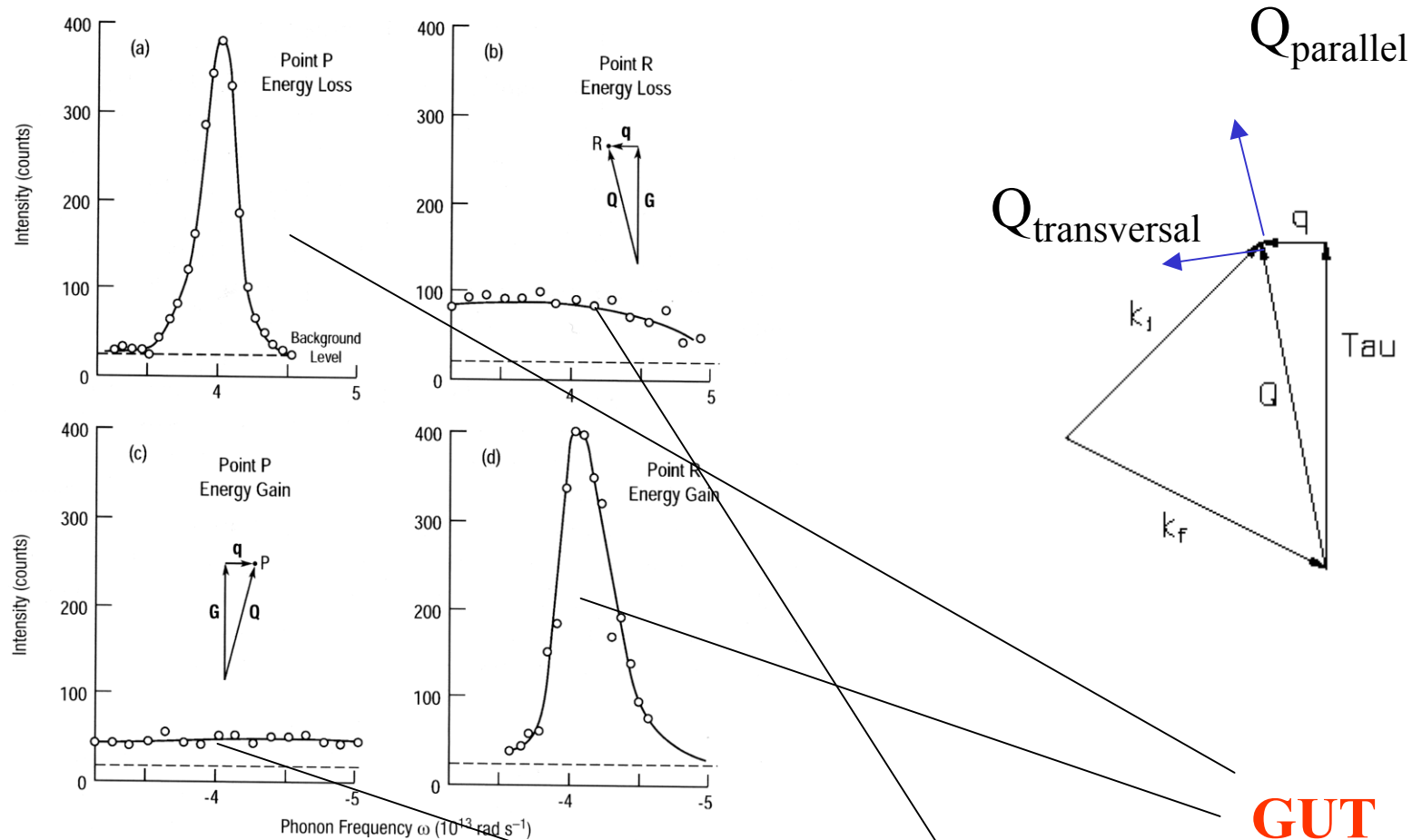
Fig. 4.5. Examples demonstrating focusing for Q_{\parallel} . Dashed line: cross section of the resolution ellipsoid in the (a) ω - Q_{\parallel} plane, and (b) ω - Q_{\perp} ; solid line: projection of the ellipsoid onto each plane. Calculated for $Q = 0.5 \text{ \AA}^{-1}$, $E_f = 14.7 \text{ meV}$, horizontal collimations of $40'-40'-40'-40'$, and $\eta_M = \eta_A = 24'$. Note that conditions for focusing in ω - Q_{\parallel} are best at the extremes of energy transfer; the long axis of the resolution ellipsoid rotates as $\hbar\omega$ changes.

- auch longitudinal gibt es Fokussierungseffekte !

Prinzipielle Arbeitsweise : 3-Achsenspektrometer



Fokussierung intrinsisch



GUT

SCHLECHT

Fig. 4.4. Constant- Q scans of a transverse phonon propagating along a $[111]$ direction in MgO measured for (a, b) energy gain and (c, d) energy loss at (a, d) focused and (b, c) unfocused positions using a right-handed spectrometer (from Peckham, Saunderson, and Sharp, 1967).

Höhere Ordnungen

-wenn der (002)-Reflex $E=14.7\text{meV}$ reflektiert, passiert $4 \cdot 14.7\text{meV}$ über den (004)-Reflex $\rightarrow \lambda/2$ -Kontamination und analog ...

-Problem bei Monochromator und Analysator !

Lösung Filter

a) Be-Filter
unterdrückt
 $k < 1.55 \text{ \AA}^{-1}$, $\lambda < 4.1 \text{ \AA}$
muss man kühlen

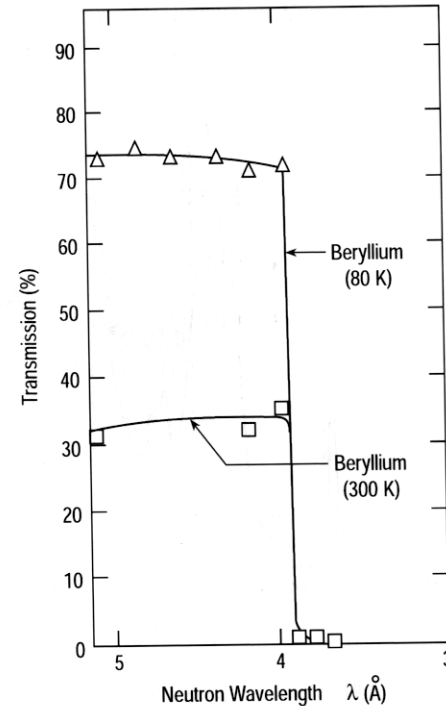


Fig. 3.12. Transmission of a 15-cm length of polycrystalline beryllium as a function of wavelength measured at $T = 300 \text{ K}$ and 80 K (from Tennant, 1988).

b) PG-Filter

- pyrolithischer Graphit : (001)-orientiert

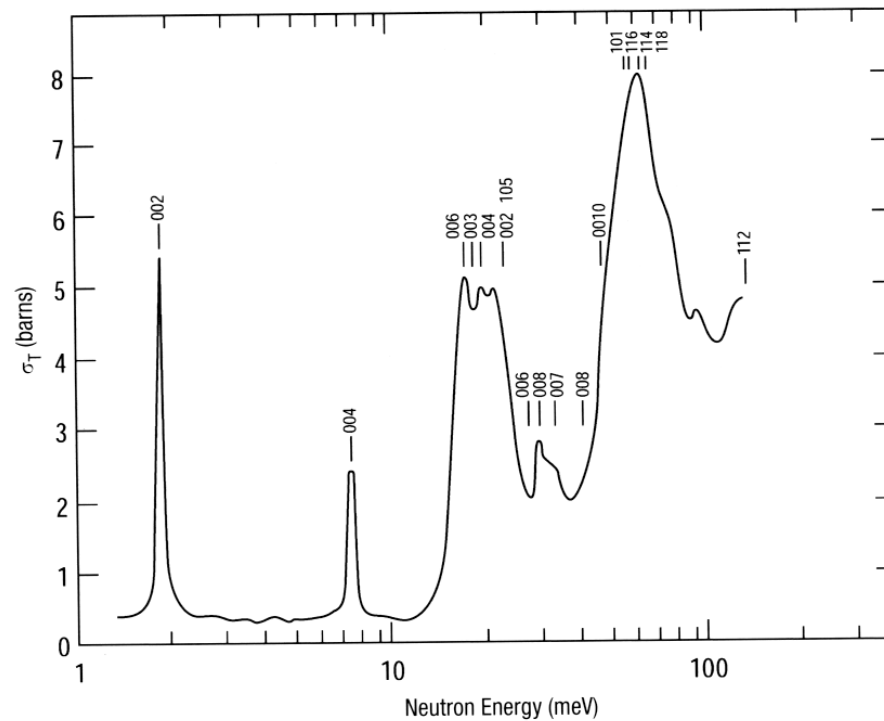
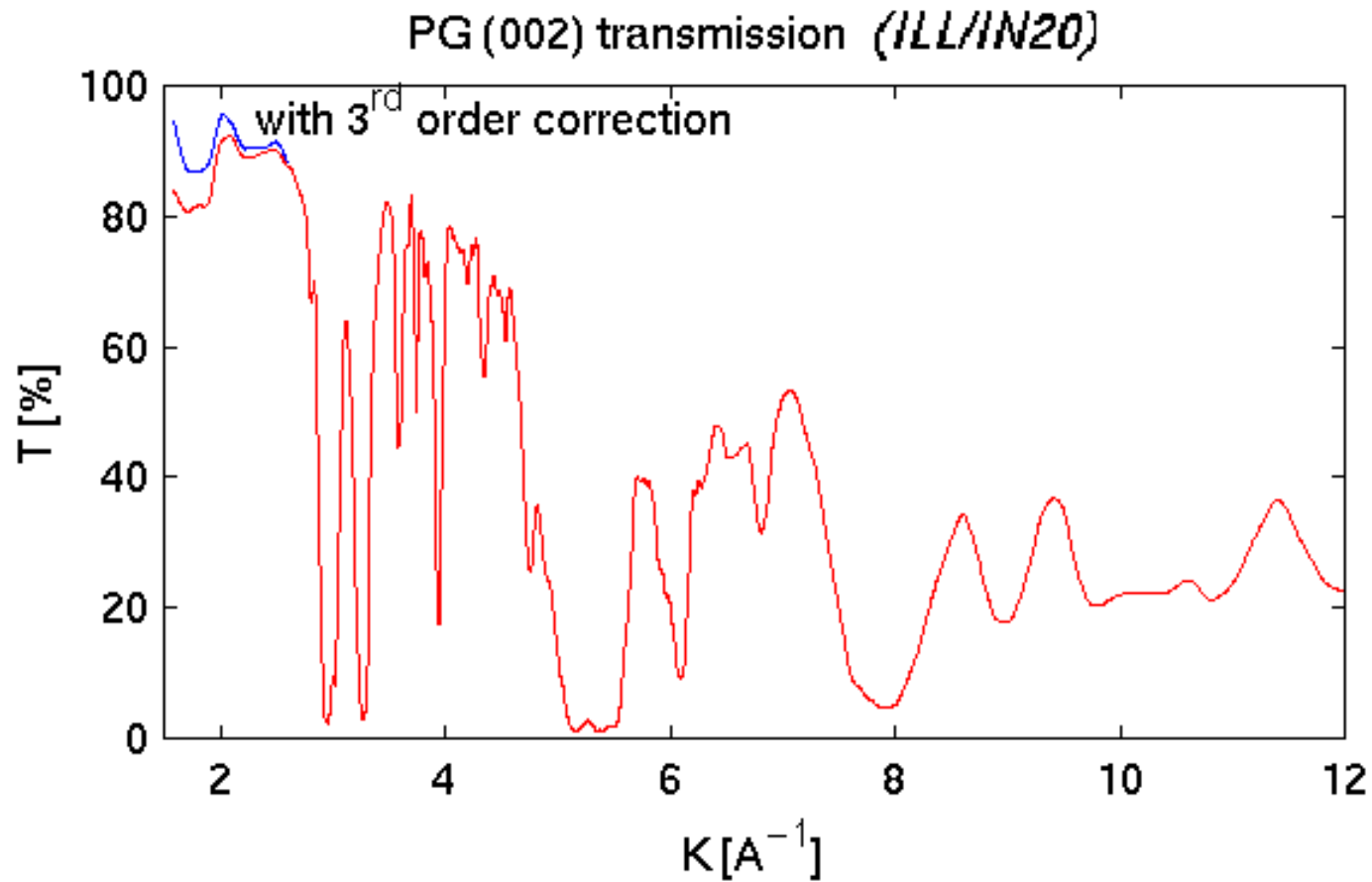


Fig. 3.13. Total cross section per atom of pyrolytic graphite (PG) as a function of energy for an incident neutron beam aligned along the *c*-axis (from Loopstra, 1966). The numbers correspond to scattering by various Bragg reflections.

b) PG-Filter



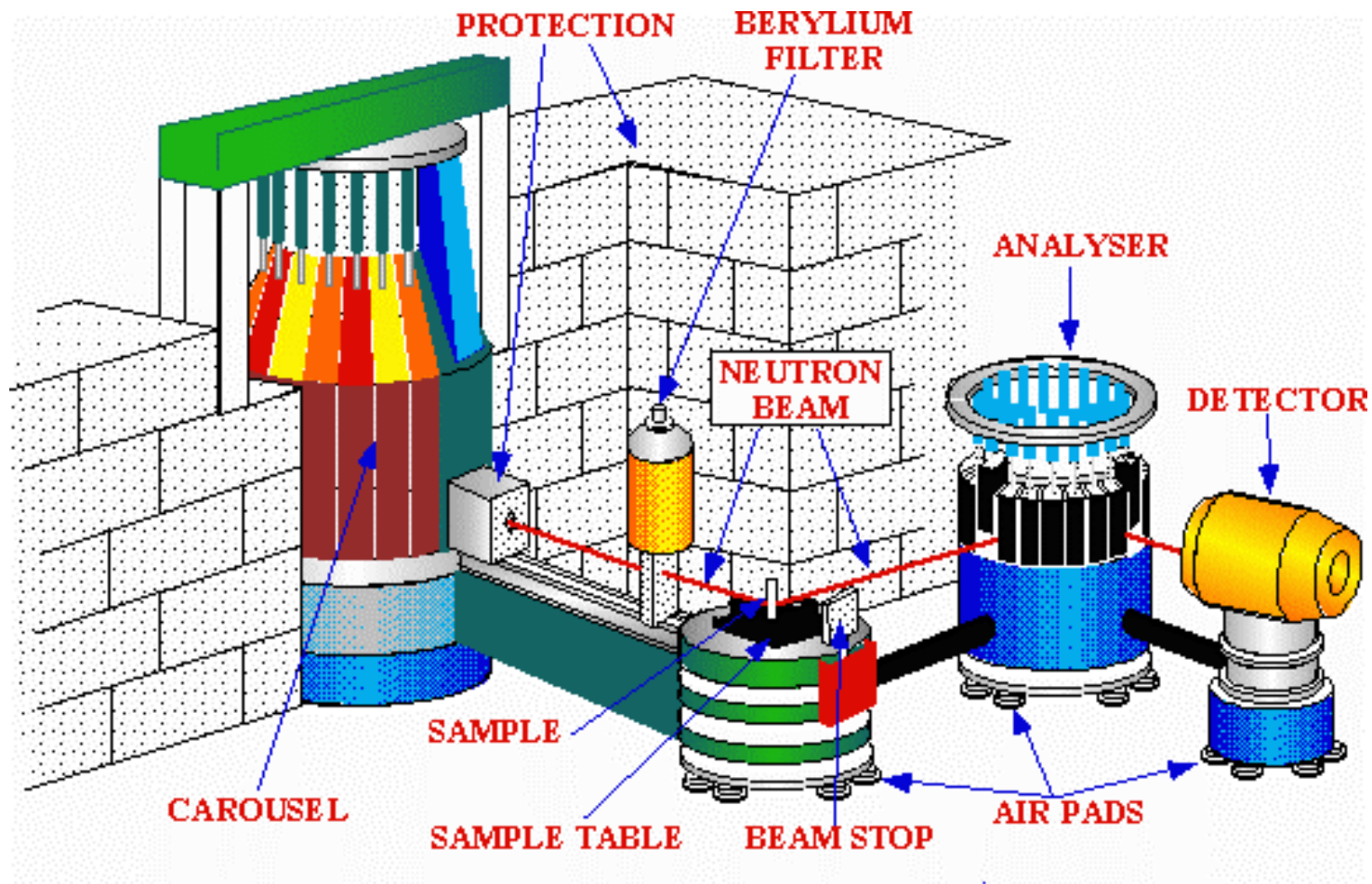
B. Hennion

b) PG-Filter

K	E	Velocity	Lambda	2 nd order (3rd)	1st order
[A ⁻¹]	[meV]	[m/s]	[Å]	[% of 1st order]	[%]
1.49	4.6	938	4.22	3 (50 %)	95
1.64	5.57	1030	3.83	3.4 (4 %)	82
1.97	8.04	1240	3.19	20	89
2.37	11.6	1490	2.65	30	90
2.571	13.70	1620	2.44	0.1	88
2.662	14.68	1680	2.36	0.2	86
3.4	24	2140	1.85	45	70
3.7	28.4	2330	1.7	36	81
3.84	30.6	2420	1.64	10	64
4.1	34.8	2580	1.53	8	63
4.4	42	2830	1.4	27	67

- magische Zahlen !

IN14 kaltes Dreiachsenpektrometer ILL



IN14 kaltes Dreiachsenspektrometer ILL

monochromator PG (002) ($d = 3.355 \text{ \AA}$) (vertically focussing)

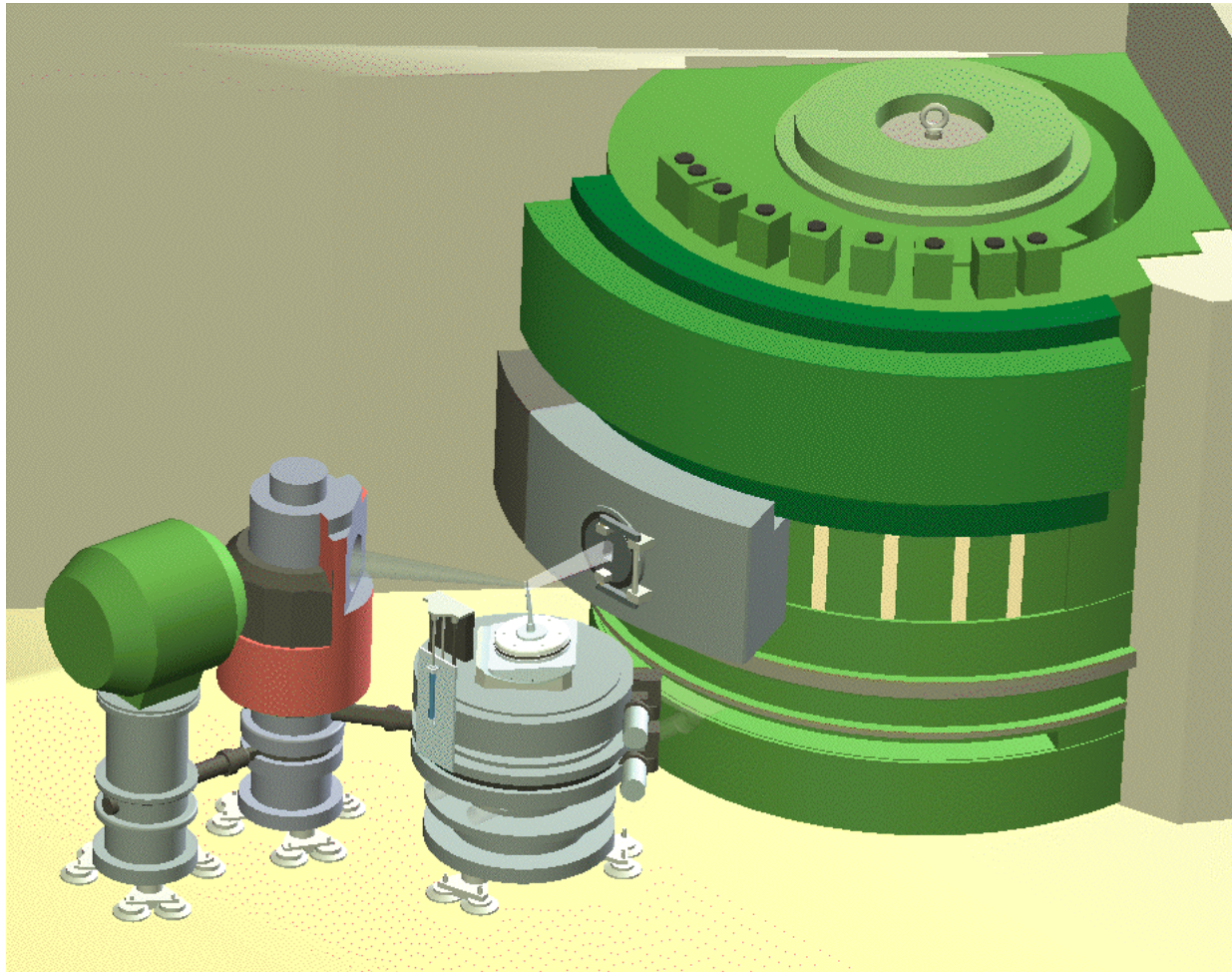
flux at sample $k_i=2.66 \text{ \AA}^{-1}$; PG-filter $3.4 \times 10^7 \text{ n cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

$k_i=1.55 \text{ \AA}^{-1}$; Be-filter $1.6 \times 10^7 \text{ n cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$

$k_i=1.05 \text{ \AA}^{-1}$; Be-filter $4.8 \times 10^6 \text{ n cm}^{-2} \text{ s}^{-1}$



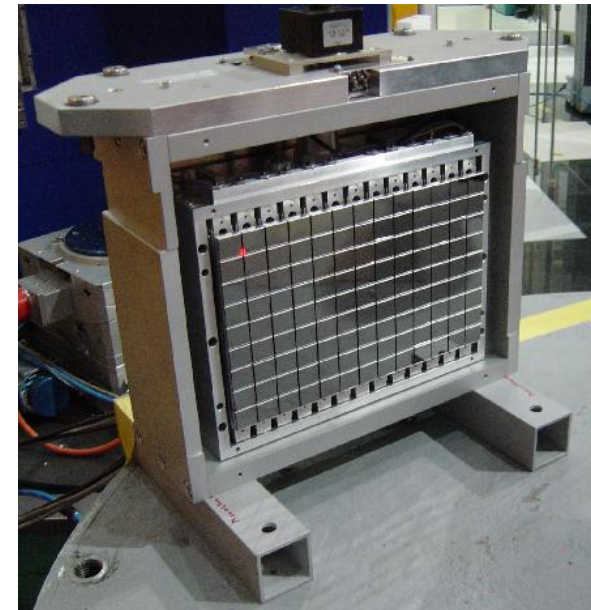
IN8 thermisches Dreiachsenspektrometer ILL



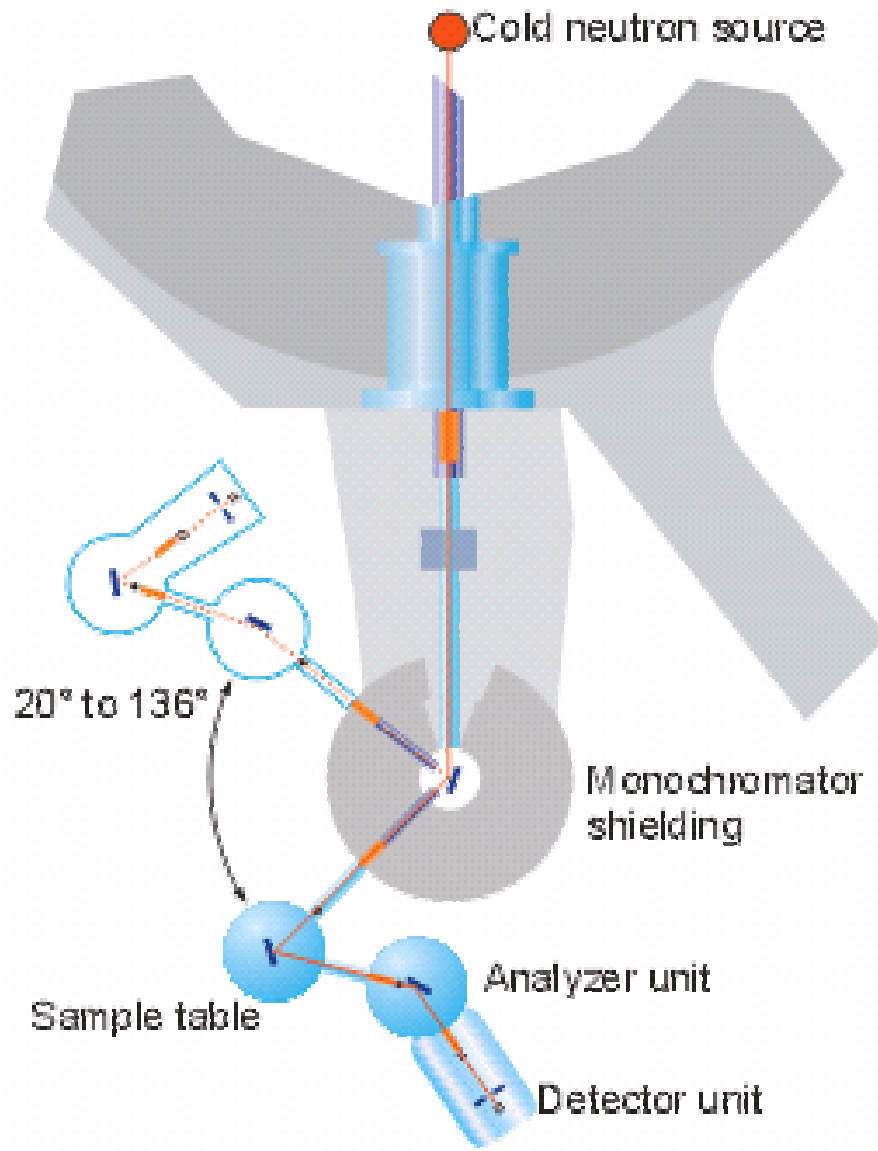
IN8 thermisches Dreiachsenspektrometer ILL

Monochromator Crystal (expected)	W x H (mm ²)	k _i /Å ⁻¹	flux/10 ⁸ n cm ⁻² s ⁻¹
PG (002) double focusing	233x197	2.662	5.5
		4.1	15
Cu (200) double focusing	233x197	4.1	6.5
Si (111) vert. foc., horiz. bent	260x197	5.0	3.5
Useful range of		k _i 2.6.....9	Å ⁻¹

PUMA thermisches Dreiachsenspektrometer FRM-II



PANDA kaltes Dreiachsenspektrometer FRM-II



B) Flugzeitspektrometer

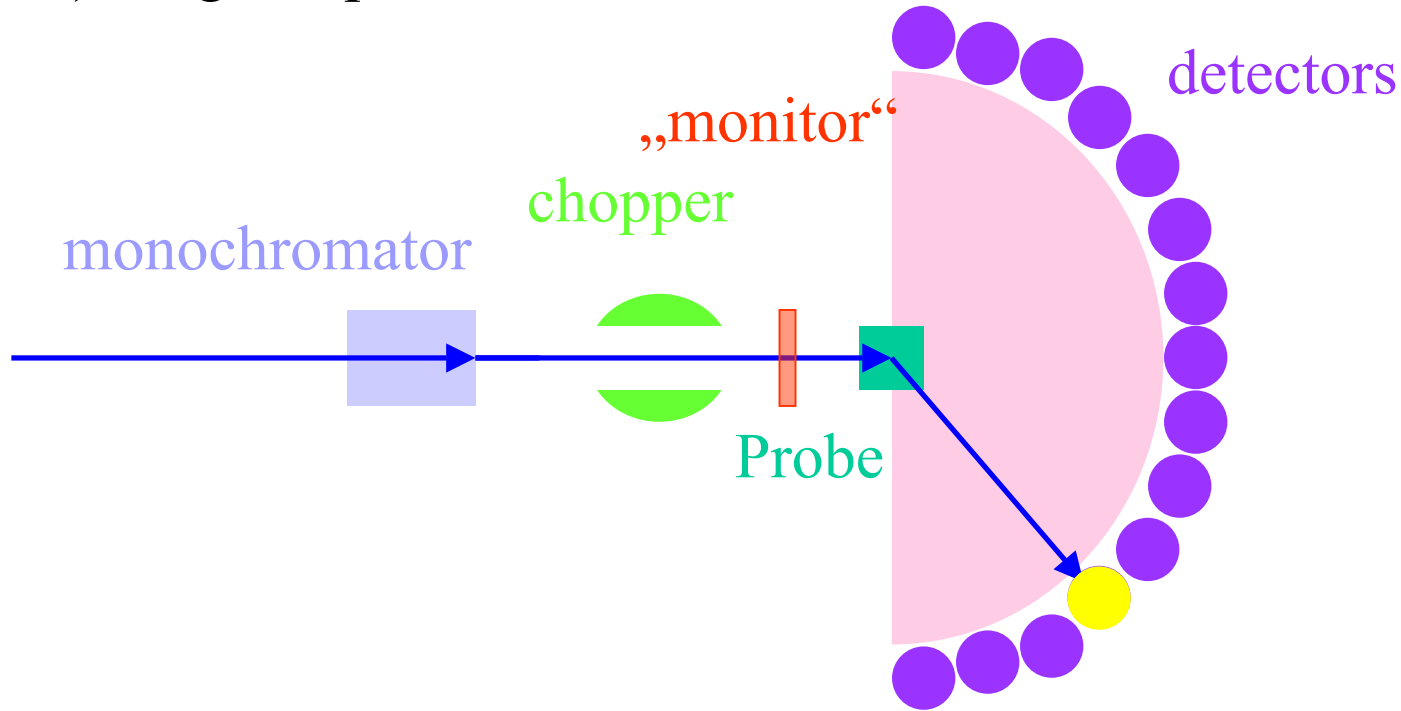
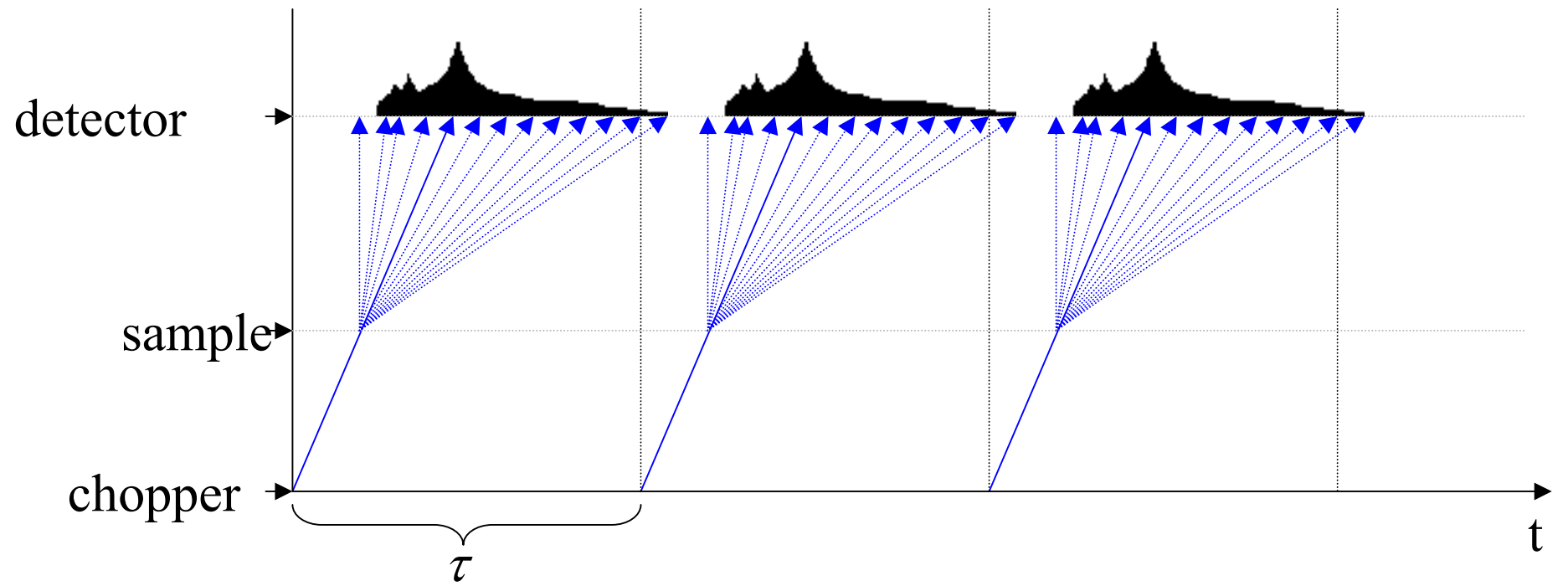


Bild Komarek

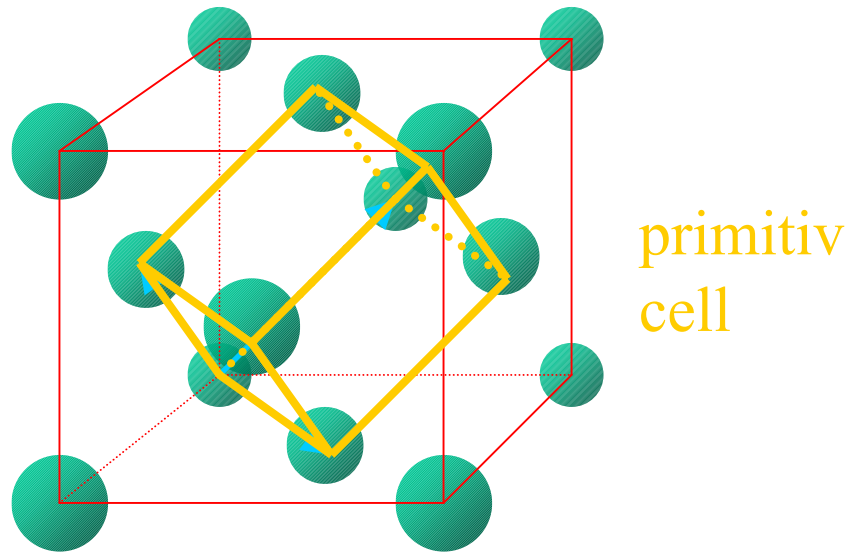
- Monochromator bestimmt Energiefenster
- Chopper öffnet kurz → Neutronenpakete
- Streuprozess → Änderung der Energie (Geschwindigkeit)
- mehrere 100 Detektoren



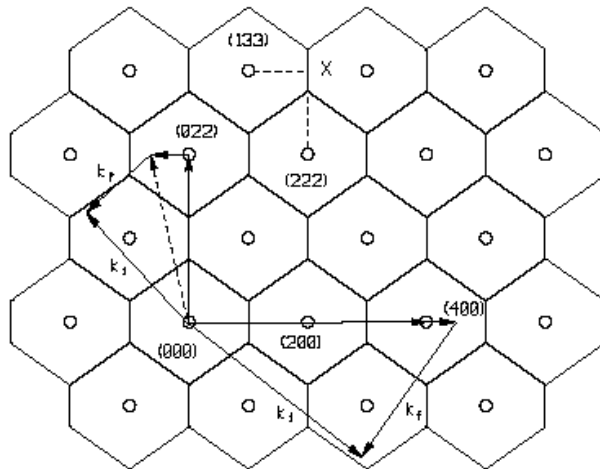
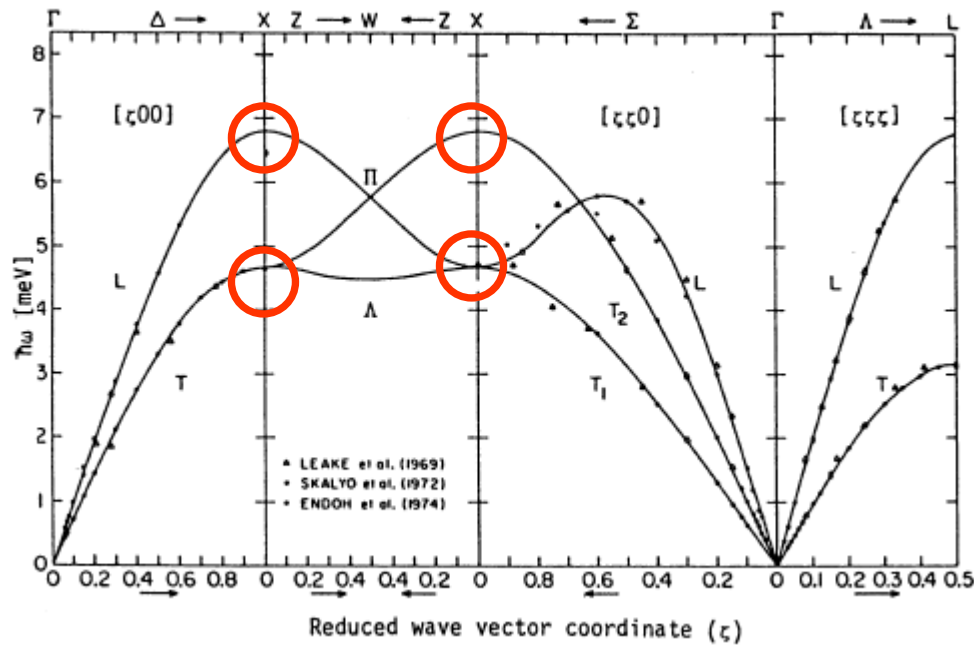
III Phononen in einfacher Struktur

Neon (Ne)

- fcc-Gitter
- ein Atom in der primitiven Zelle

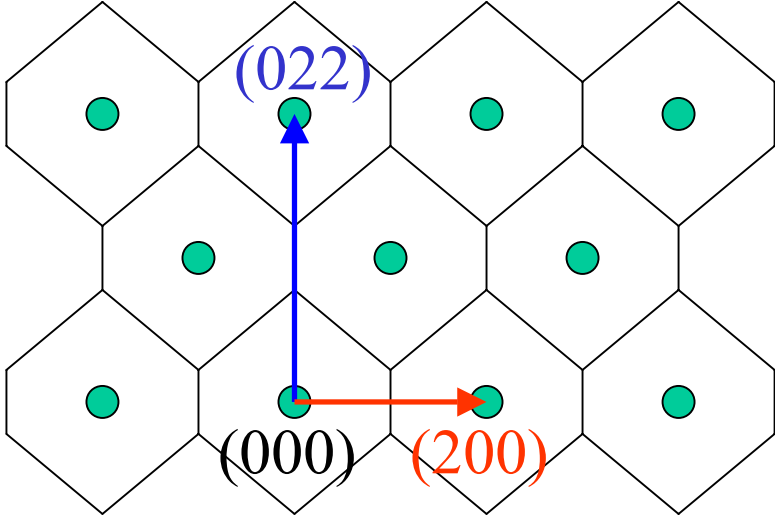


Neon



-ein Atom \rightarrow 3 Zweige
 entlang $[x00]$ und $[xxx]$ Entartung
 -Zweige stoßen bei bestimmten
 q -Werten zusammen

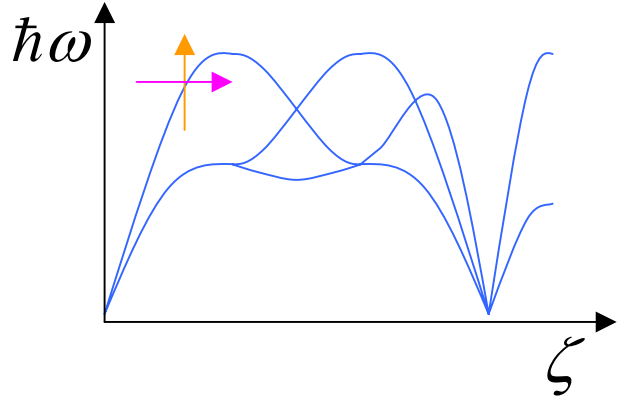
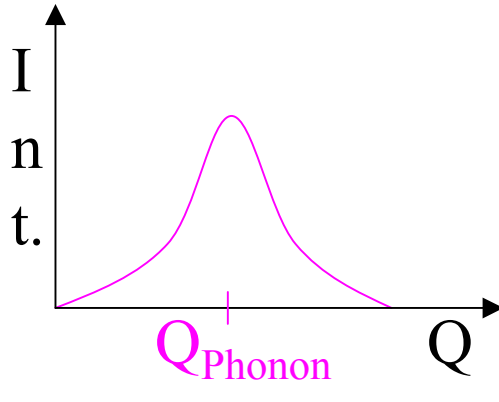
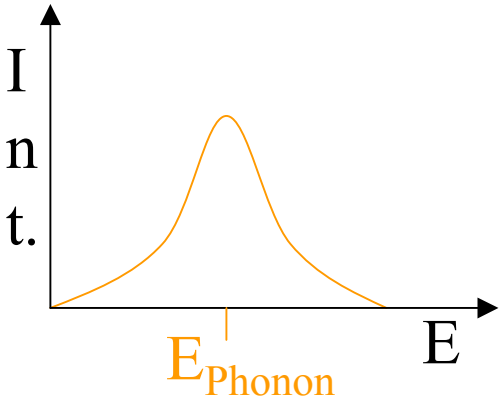
Reziproker Raum von Neon



Wie bestimmt man einen Punkt auf der Phononendispersion ?

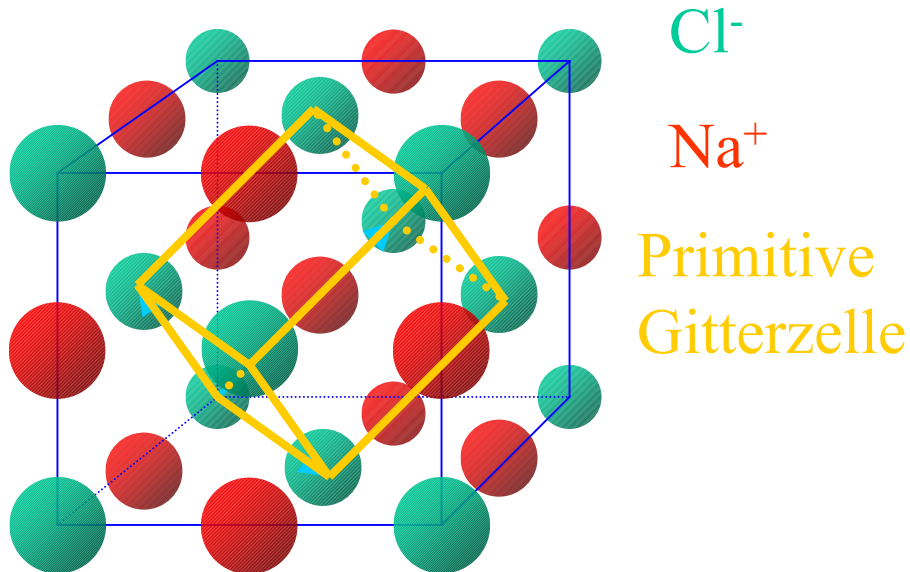
Q-konstant : E variabel

E-konstant : Q variabel

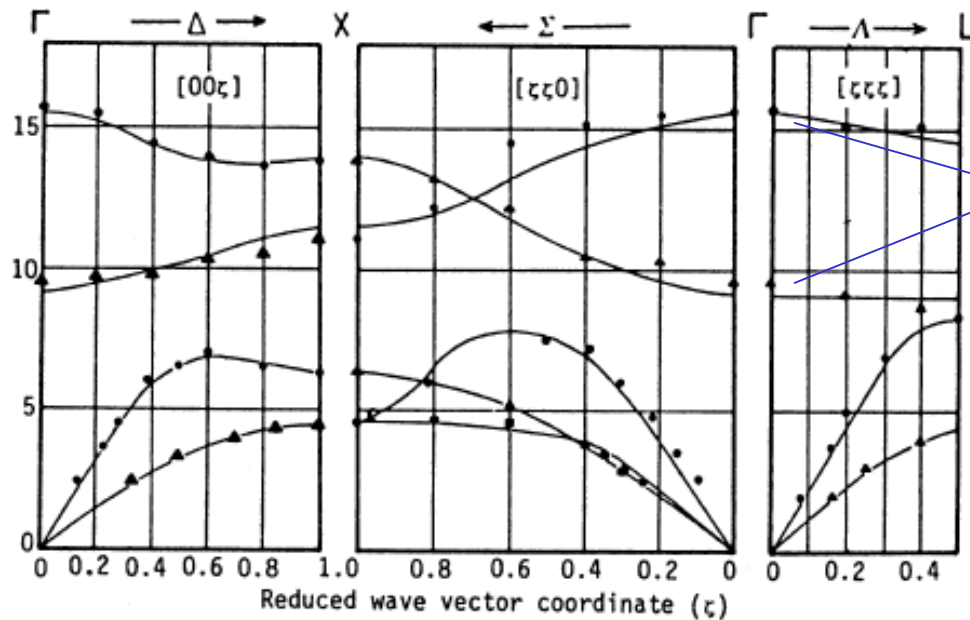


NaCl-Struktur

- fcc-Gitter
- primitive Zelle : ein Cl^- -Ion bei (000) und ein Na^+ -Ion bei $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
- zwei fcc-Gitter um $(\frac{1}{2}\frac{1}{2}\frac{1}{2})$ verschoben



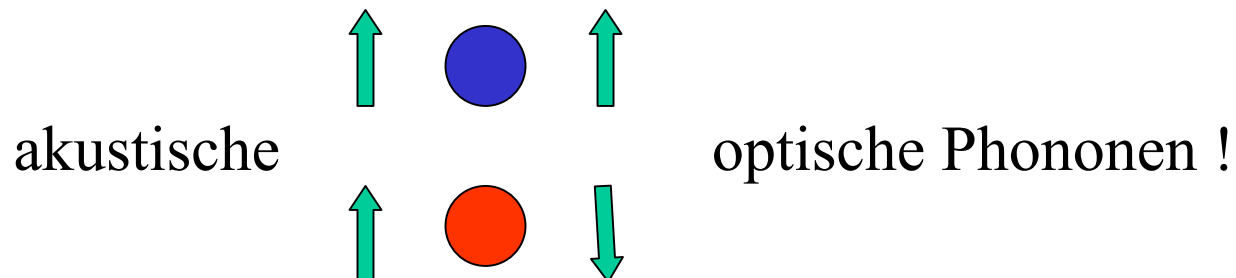
FeO



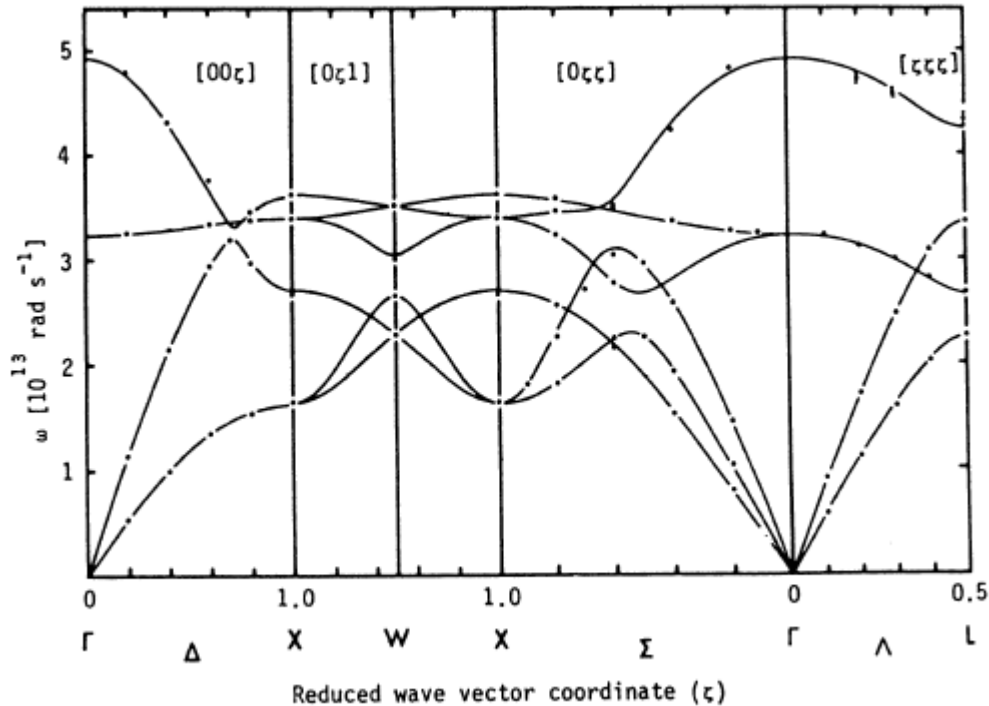
LO-TO-splitting

acoustic phonons

- zwei Atome \rightarrow 6 Zweige aber Entartung !!!



NaCl



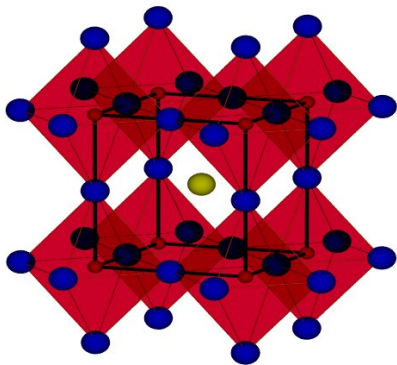
LO-TO-Aufspaltung gross

akustische und optische
Phononen mischen

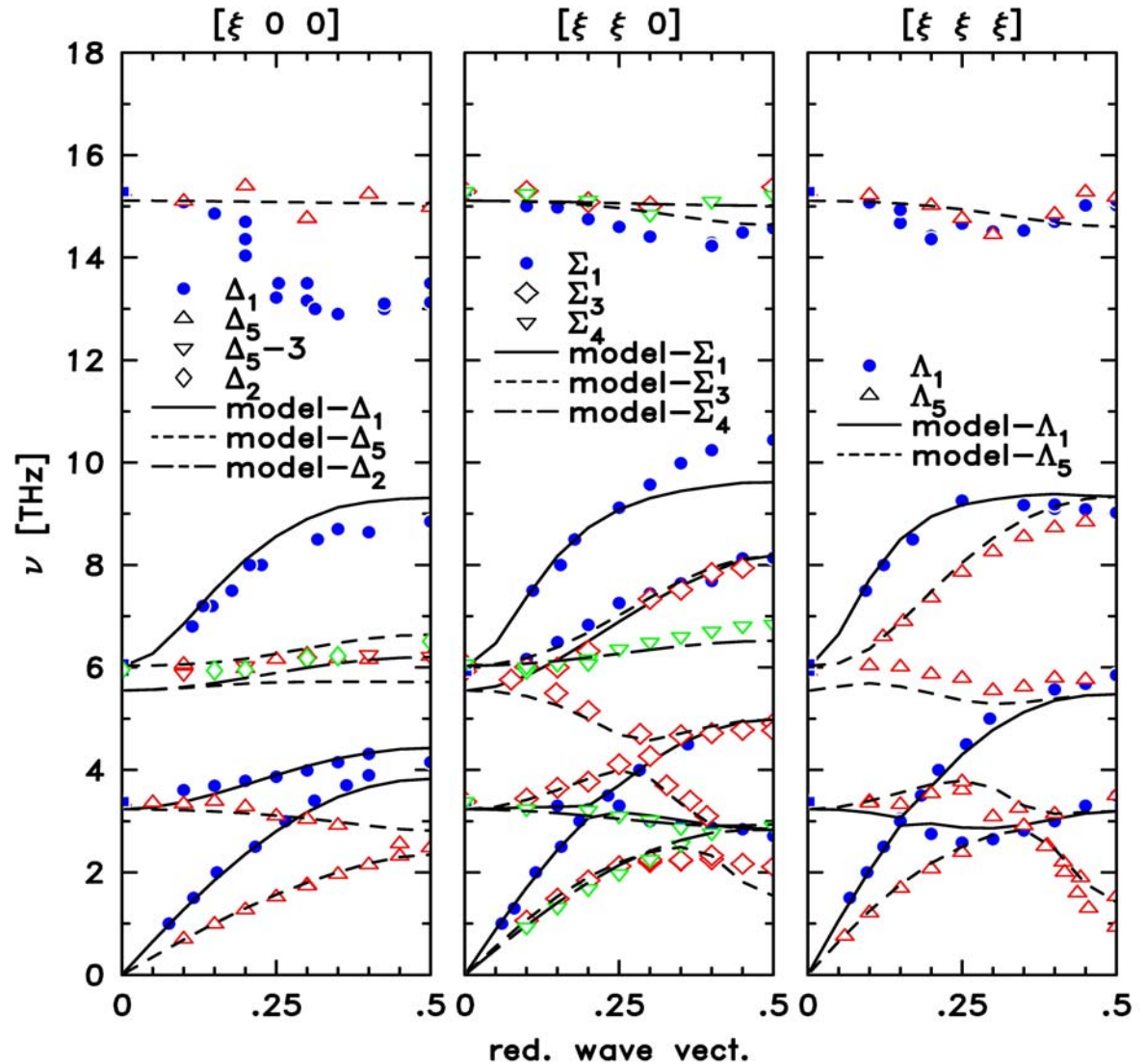
**-Wechselwirkung zwischen Zweigen gleicher Symmetrie
keine Kreuzung sondern Lücke !!!**

Gitterdynamik in Perowskit-Verbindungen

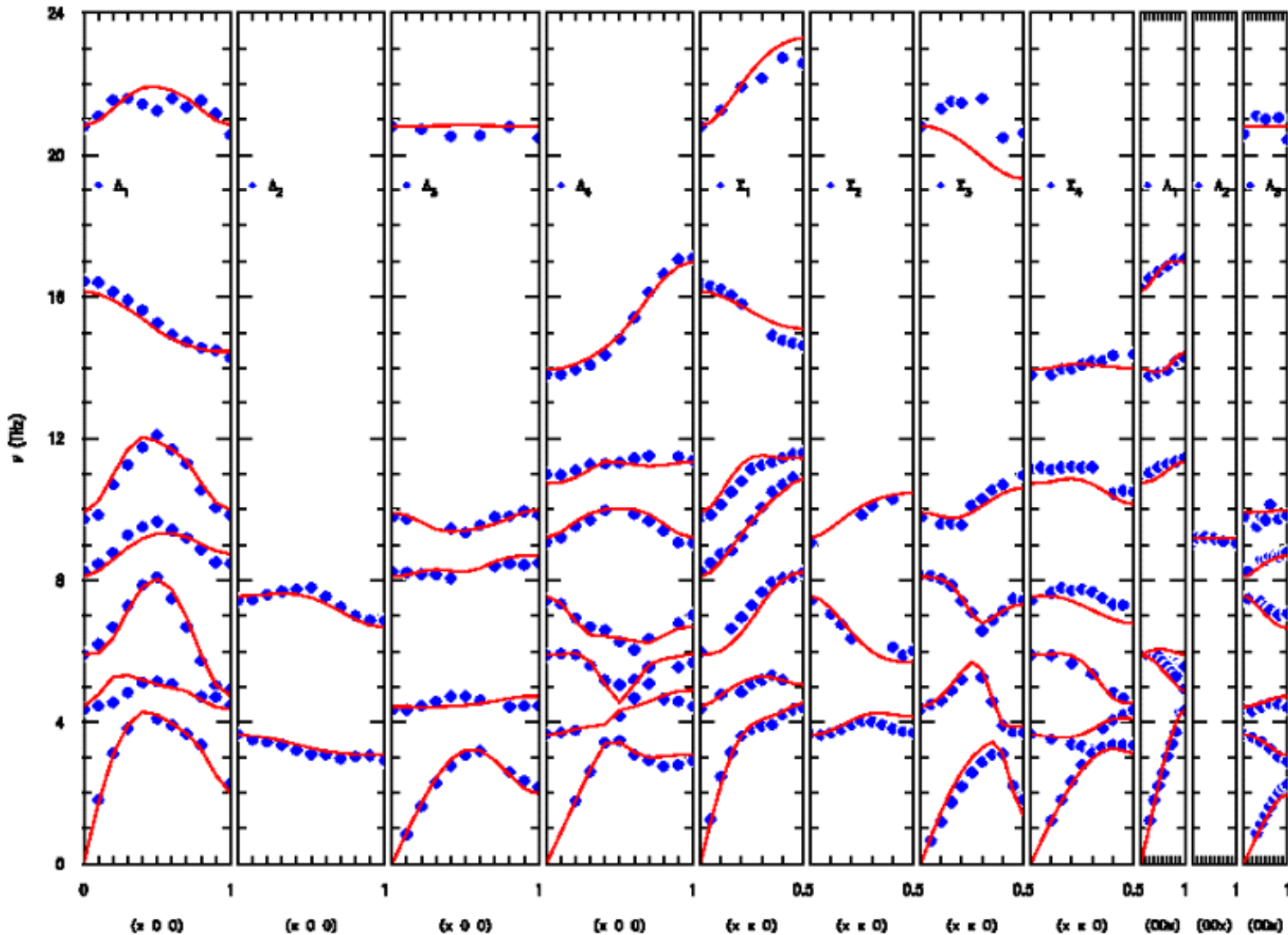
perovskite
 \implies 5 atoms
 \implies 15 branches



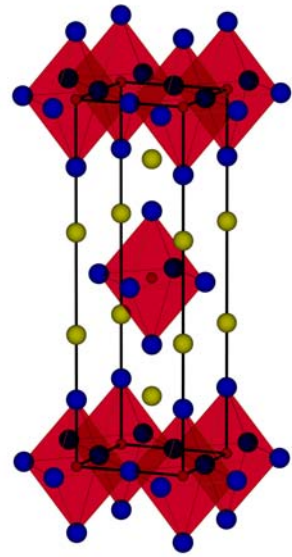
lines :
Shell-model
with screening



Gitterdynamik in Sr_2RuO_4



I4/mmm
7atoms
 \Rightarrow
21 branches

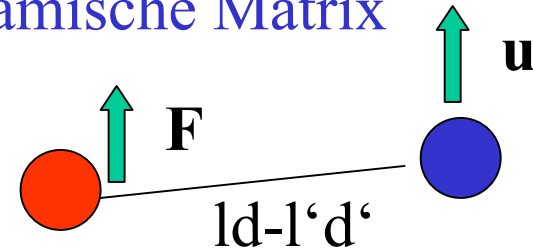


Braden et al.,
 unpublished.

IV. Model-Rechnungen

Gitterdynamik wird beschrieben durch die dynamische Matrix

$$\omega^2 \underline{e} = \bar{D} \underline{e}$$



$$D_{\alpha,\beta}(\underline{d}, \underline{d}') = \frac{1}{(m_{\underline{d}} m_{\underline{d}'})^{1/2}} \sum_{\underline{l}} \Phi_{\alpha,\beta}(0\underline{d}, \underline{l}'\underline{d}') \exp(i\underline{q}\underline{l}')$$

$\Phi_{\alpha,\beta}(0\underline{d}, \underline{l}'\underline{d}')$ denote the force constants between the atoms \underline{d} and \underline{d}' in by \underline{l} shifted cells

- Problem : Welche Kraftkonstanten und wie viele?

Beschränkung auf nahe Nachbarn und Symmetrie

- einfacher Fall : Potential $V(r)$ nur durch Abstand bestimmt

→ Beschreibung mit 2 Kraftkonstanten (Born von Karman)

$$\Phi_R(\underline{l}\underline{d}, \underline{l}'\underline{d}') = \left. \frac{\partial^2 V}{\partial r^2} \right|_{r=r_0} \quad \text{radiale Kraftkonstante}$$

$$\Phi_T(\underline{l}\underline{d}, \underline{l}'\underline{d}') = \left. \frac{1}{r} \frac{\partial V}{\partial r} \right|_{r=r_0} \quad \text{transversale Kraftkonstante}$$

Model-Rechnungen

-**Problem** : Reichweite ! Coulomb-Potential fällt mit $1/r$
→ erstelle ein Potential und ermittle Kräfte (Ewald-Methode)

- abstossendes Potential : Born-Mayer-Potential

$$V(r) = B \cdot \exp(-r/r_0) \quad \text{nur 2 Parameter per Paar}$$

- van der Waals : $V(r) = C/r^6$

- Polarisation des einzelnen Atoms : Schalen-Modell

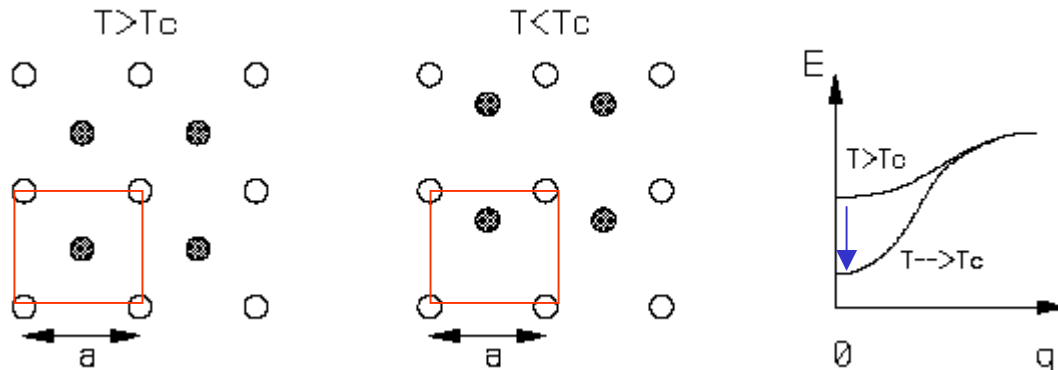
Selbst ein einfaches (falsches?) Modell ist sehr hilfreich :

a) Entartungen

b) irreduzible Darstellungen (welche Zweige kreuzen?)

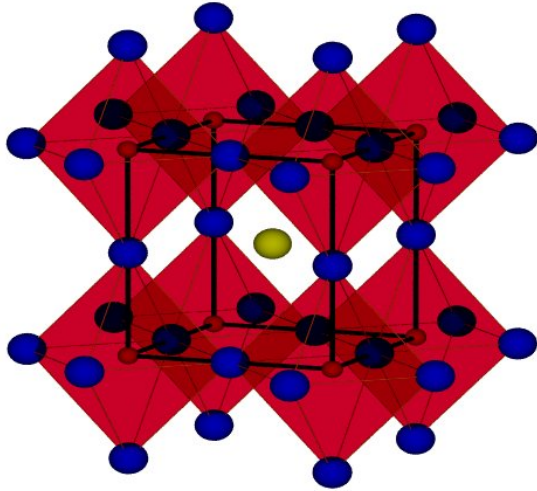
c) dynamische Strukturfaktoren → Vorhersage der „guten“ Q-Werte

V. Strukturelle Phaseübergänge soft modes



- strukturelle Phasenübergänge von aktuellem Interesse
- mikroskopische Mechanismen nur durch INS zugänglich
- kontinuierlicher Übergang \Leftrightarrow Symmetrie \Leftrightarrow soft-mode
- Entsprechung : Polarisierung der weichen Phononmode
Verzerrung der Tieftemperaturstruktur
- nahe dem Übergang : starke Dämpfung :
 - anharmonische Effekte
 - kritische Phänomene

Beispiel: ferroelektrischer Übergang im Perowskit



Perowskit ABO_3

\implies 5 Atome

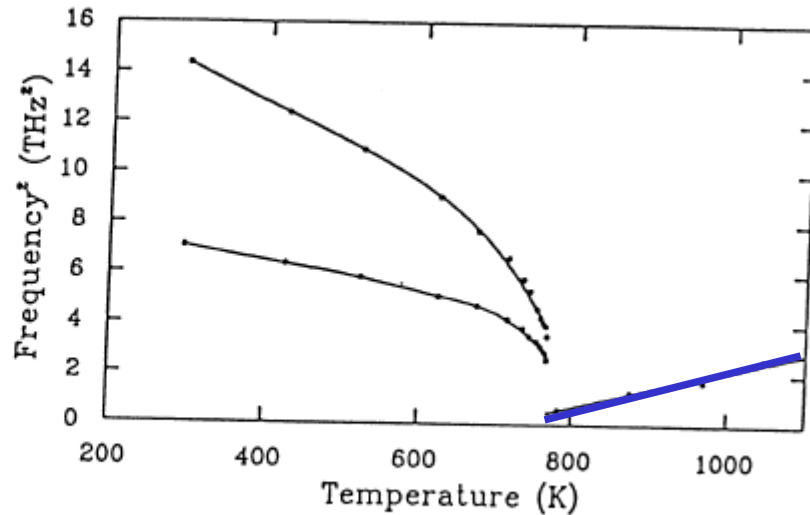
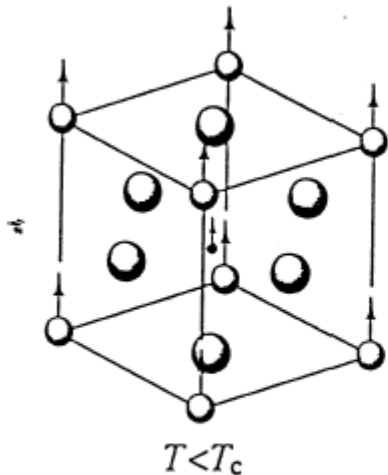
\implies 15 Zweige

kubisch \rightarrow nur 4 Gamma-Moden

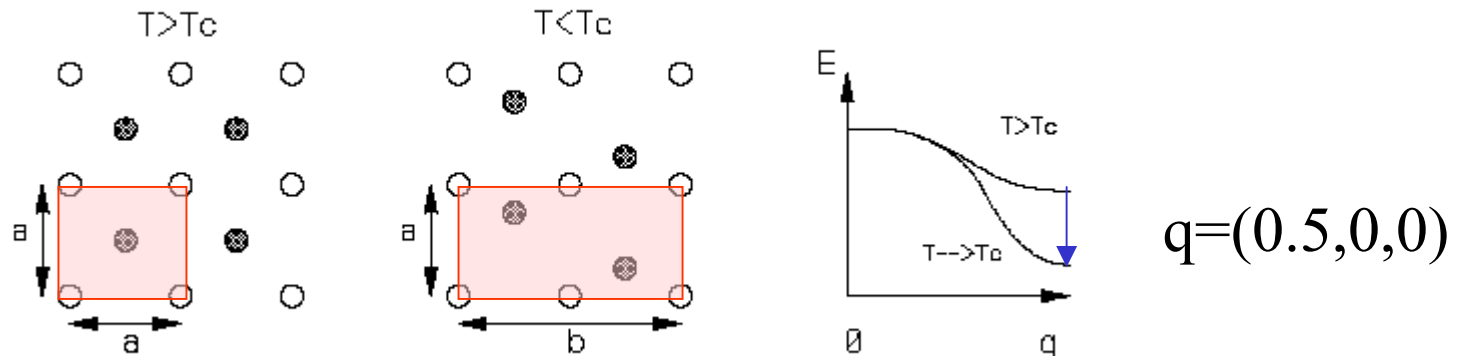
-eine TO-Frequenz verschwindet nahezu

$\rightarrow \epsilon(0) = \epsilon(\infty) \omega_{LO}^2 / \omega_{TO}^2$ divergiert

\rightarrow technische Bedeutung



Translationssymmetrie wird gebrochen $\rightarrow q \neq (0,0,0)$



-Weichwerden in Phononendispersion und T-Anhängigkeit !

- **Landau-Theorie:** klassische mean-field Theorie ohne Fluktuationen

$$G = G_0 + 0.5a(T - T_c)Q^2 + uQ^4 + \dots$$

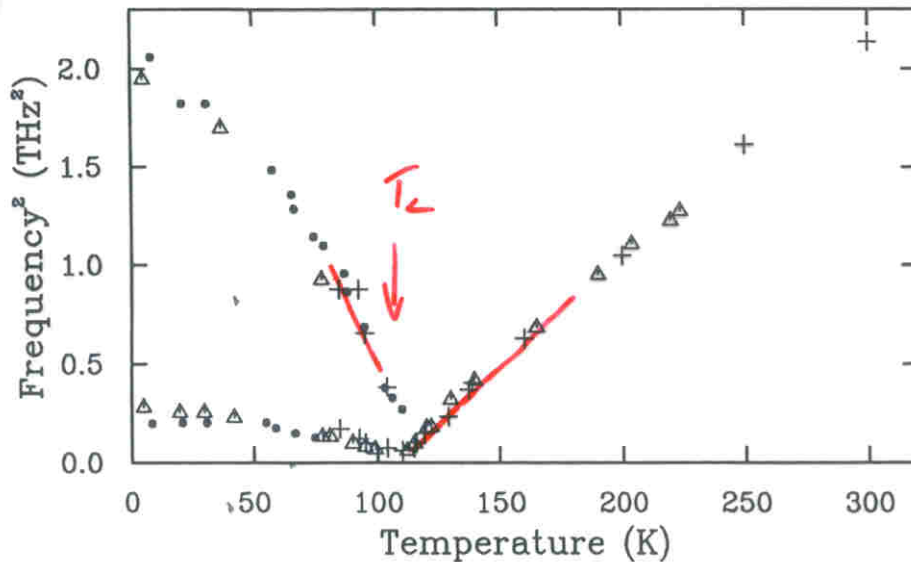
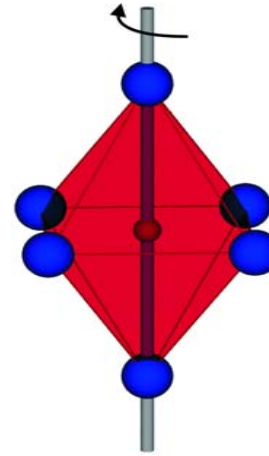
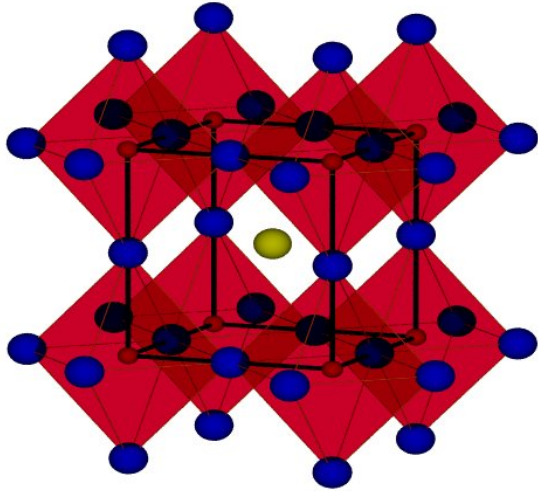
Q – order parameter $1/\omega^2$ – entsprechende Suszeptibilität

$$Q^2 = \frac{1}{4} \left(\frac{a}{u} \right) (T_c - T) \quad \text{für } T < T_c$$

$$\omega^2 = a (T - T_c) \quad \text{für } T > T_c$$

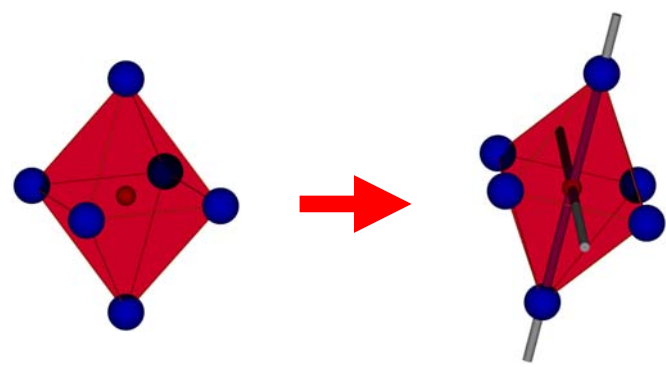
$$\omega^2 = 2a(T_c - T) \quad \text{für } T < T_c \text{ Hartwerden}$$

Soft mode Übergang in SrTiO₃

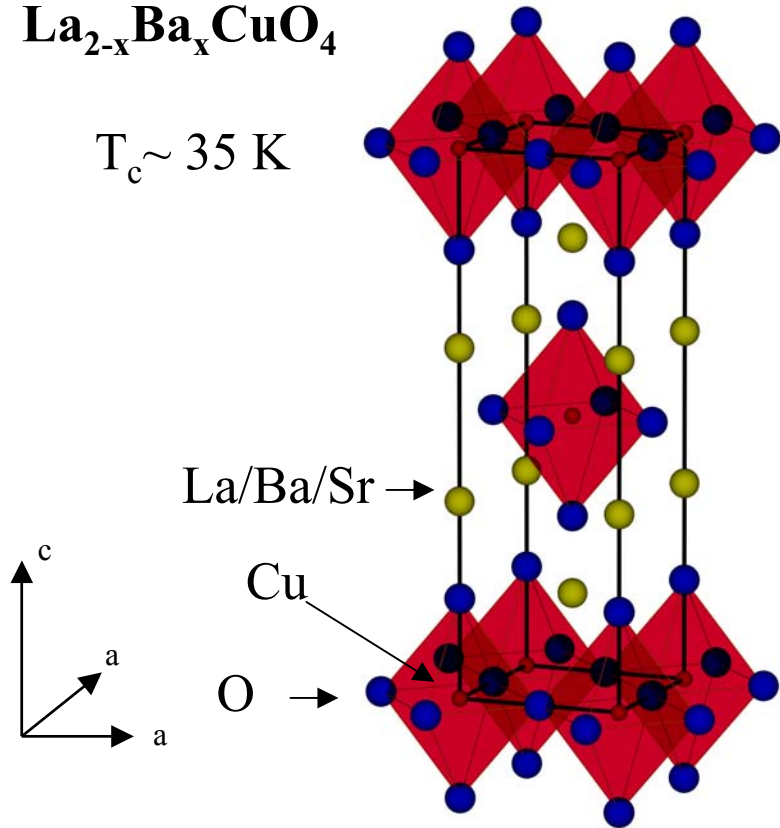


- dominanter displaziver Charakter
- nahezu vollständiges Erweichen
- siehe auch : Manganate, Kuprate
Kobaltate, Ruthenate, ...

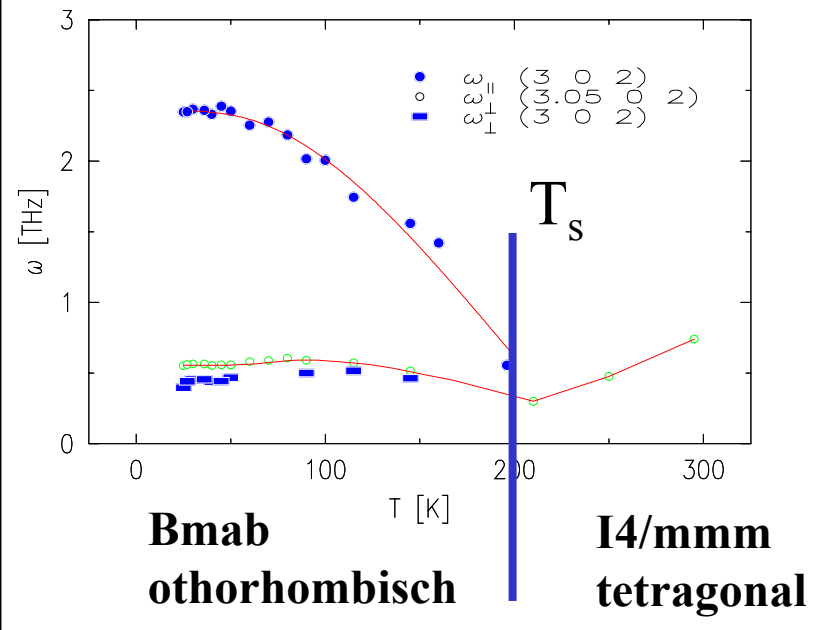
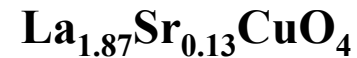
Soft-mode Übergang in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$



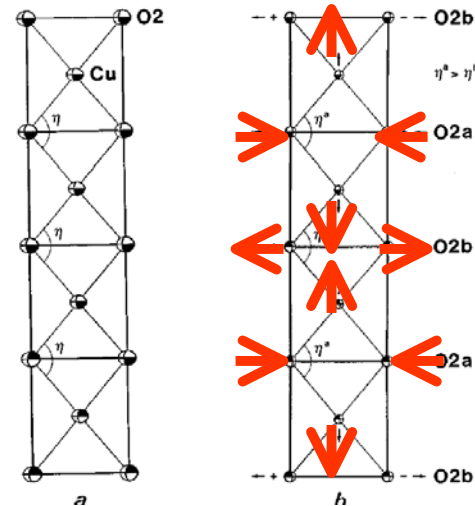
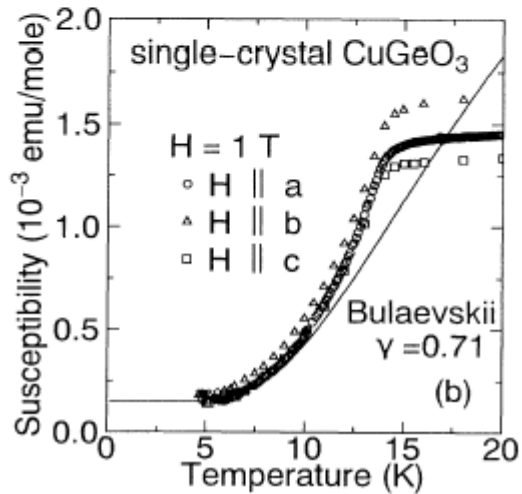
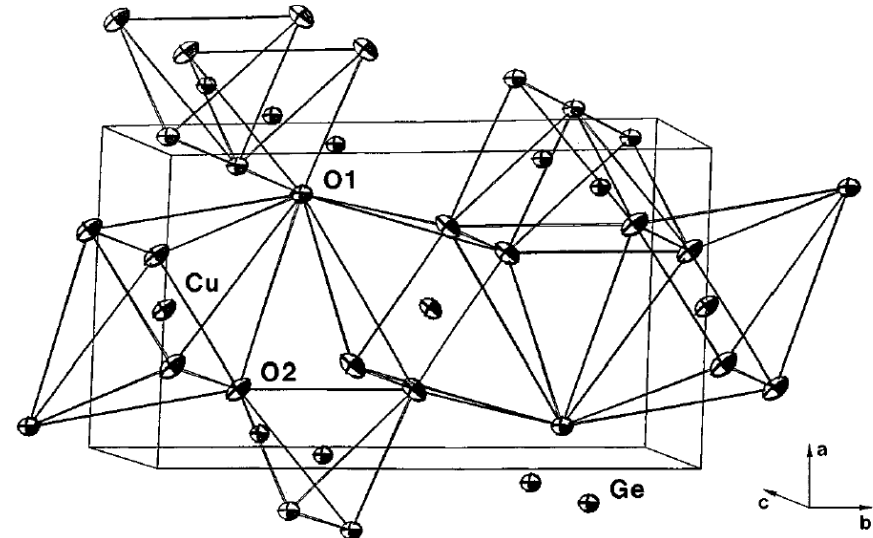
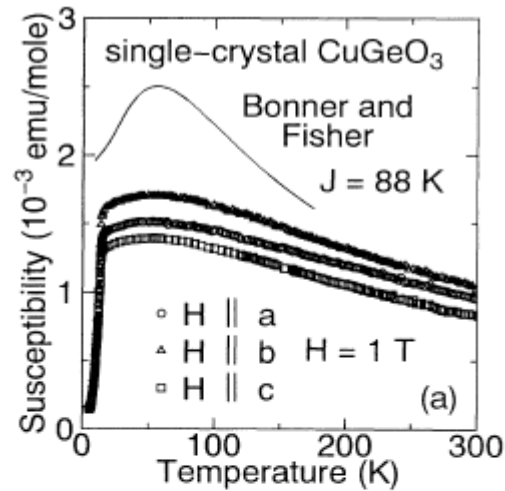
$T_c \sim 35 \text{ K}$



Typische Drehwinkel : von 3° in Kupraten
bis zu $\sim 15^\circ$ in Manganaten oder Kobaltaten

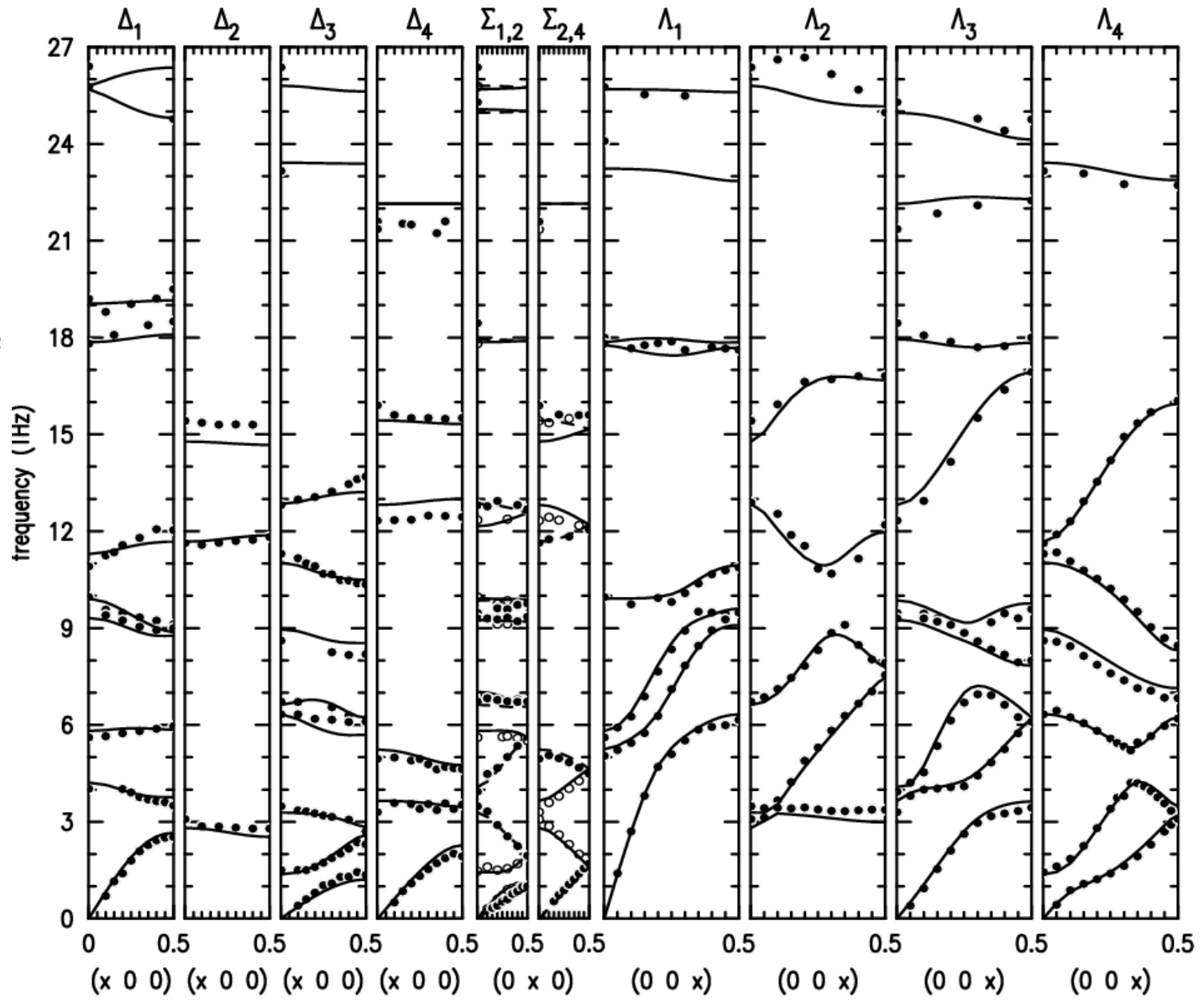


Spin-Peierls Übergang in CuGeO_3

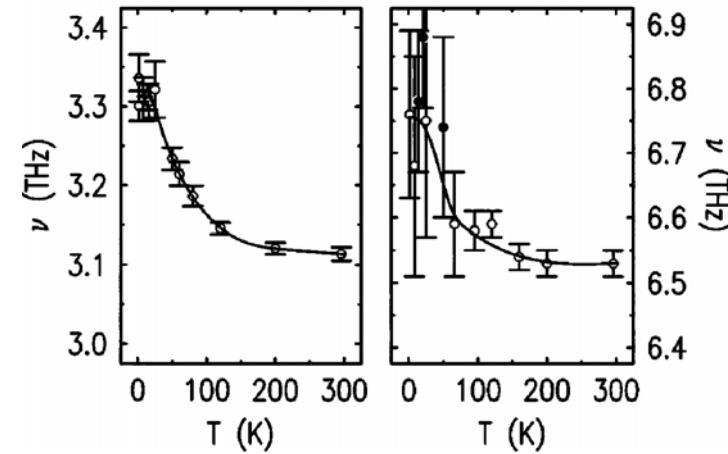
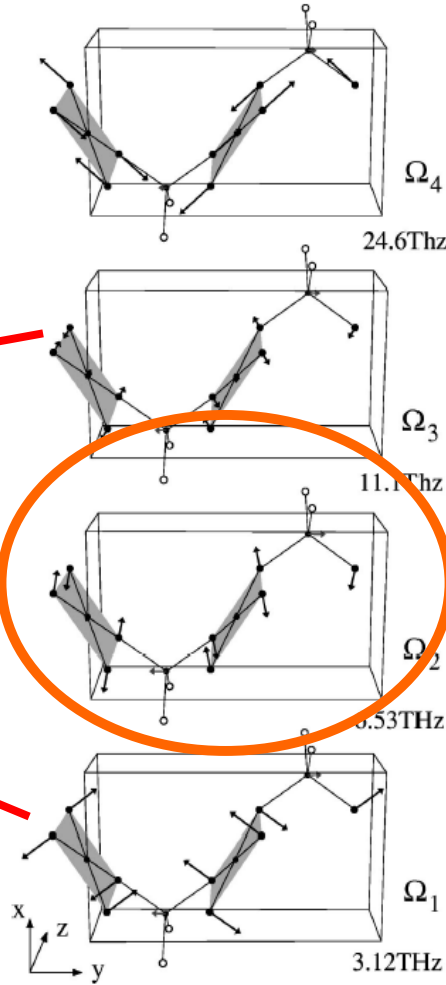
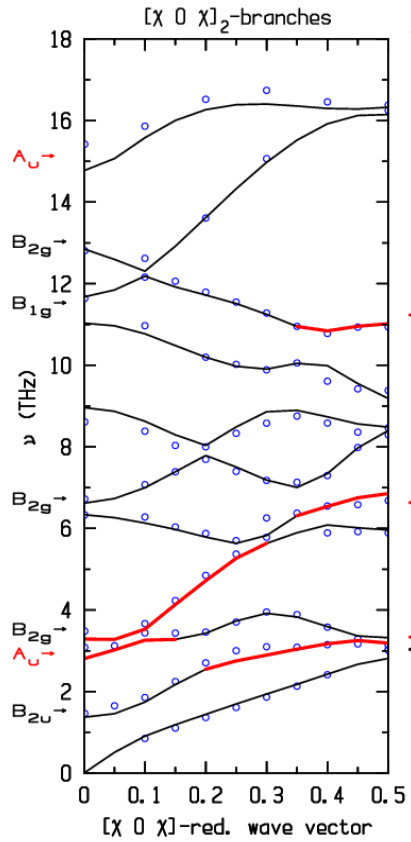


Gitterdynamik von CuGeO_3

10-Atome
→ 30 Zweige



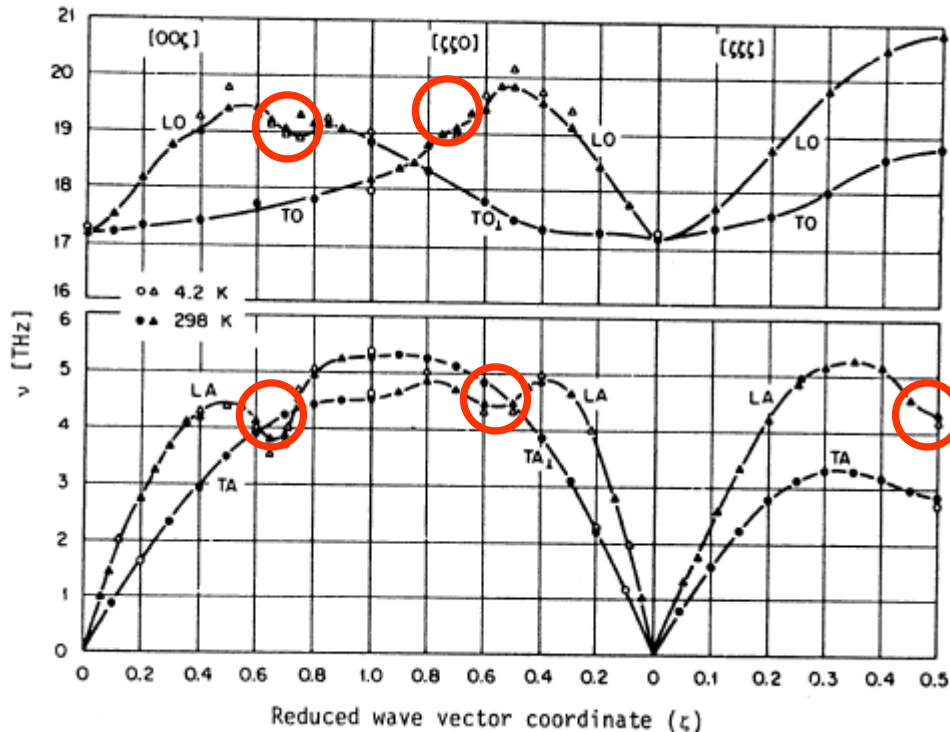
Gitterdynamik von CuGeO_3



-kein Weichwerden

VI. Elektron-Phonon-Kopplung

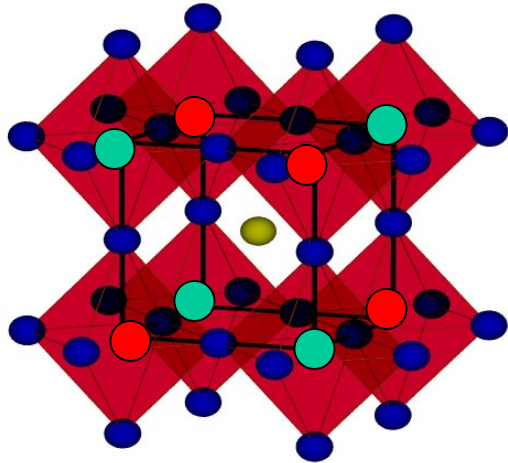
stärkste Ankopplung typisch für Moden mit q in Brillouin-Zone
→ inelastic neutron scattering (INS)



TaC
NaCl-Struktur
 $T_c = 10-12K$

-Elektron-Phonon-Kopplung sichtbar als Frequenzrenormierungen
⇔ Dips ⇔ „Phononen-Anomalien“

Phasendiagramm von $\text{Ba}_{1-x}\text{K}_x\text{BiO}_3$



BaBiO_3

Disproportionierung: Bi^{3+} - Bi^{5+}

Ladungsordnung

Dotierung Bi-Pb oder Ba-K

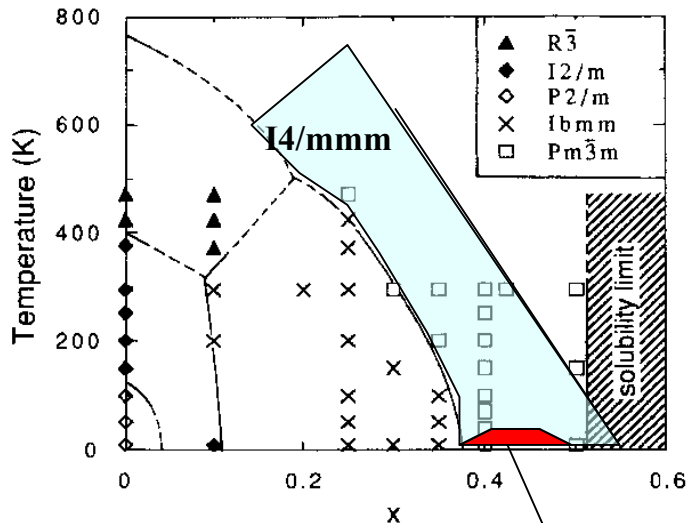


Ba(Pb/Bi)O_3

$T_C = 13\text{K}$

$(\text{Ba/K})\text{BiO}_3$

$T_C = 36\text{K}$



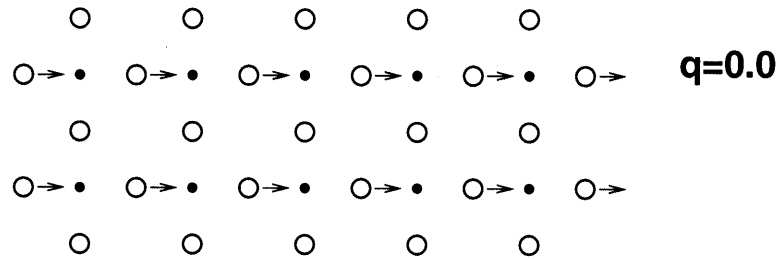
Supraleitung

Komplexes Phasendiagramm :

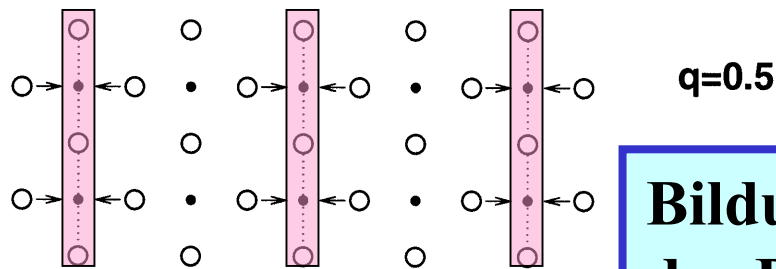
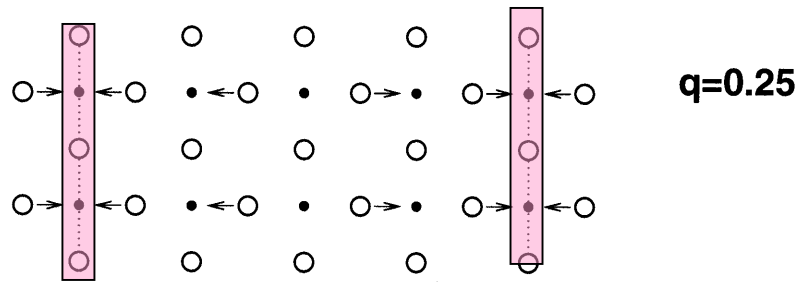
- Oktaeder-Drehungen und Ladungsordnung
- Supraleitung nur in engem Sr-Konzentrationsbereich und bei speziellem Dreh-Schema

Pei et al., PRB (1990), Braden et al., PRB (2001)

Polarisationsmuster der Bindungsstretschwingungen entlang [100]

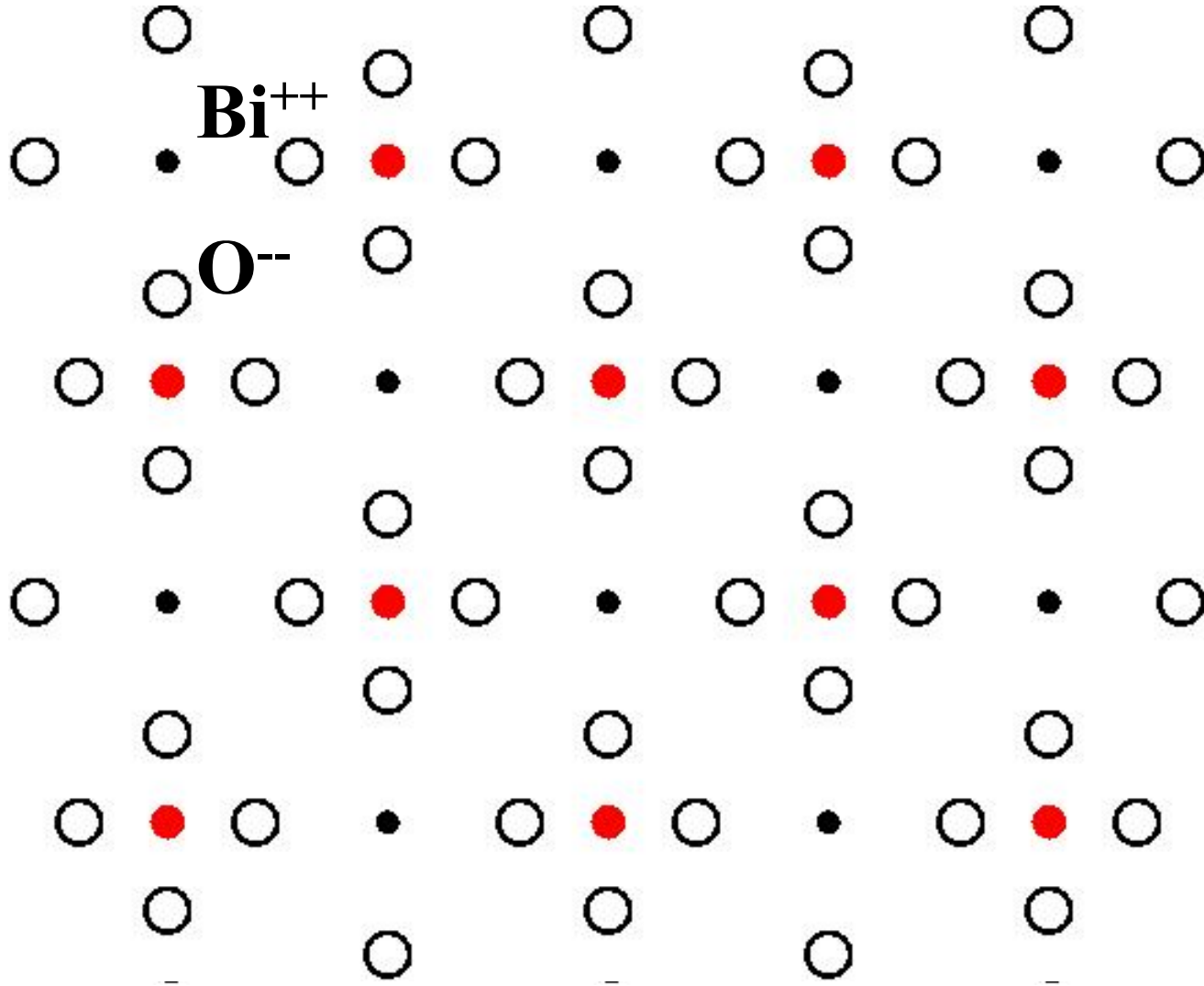


$(q \ 0 \ 0)$



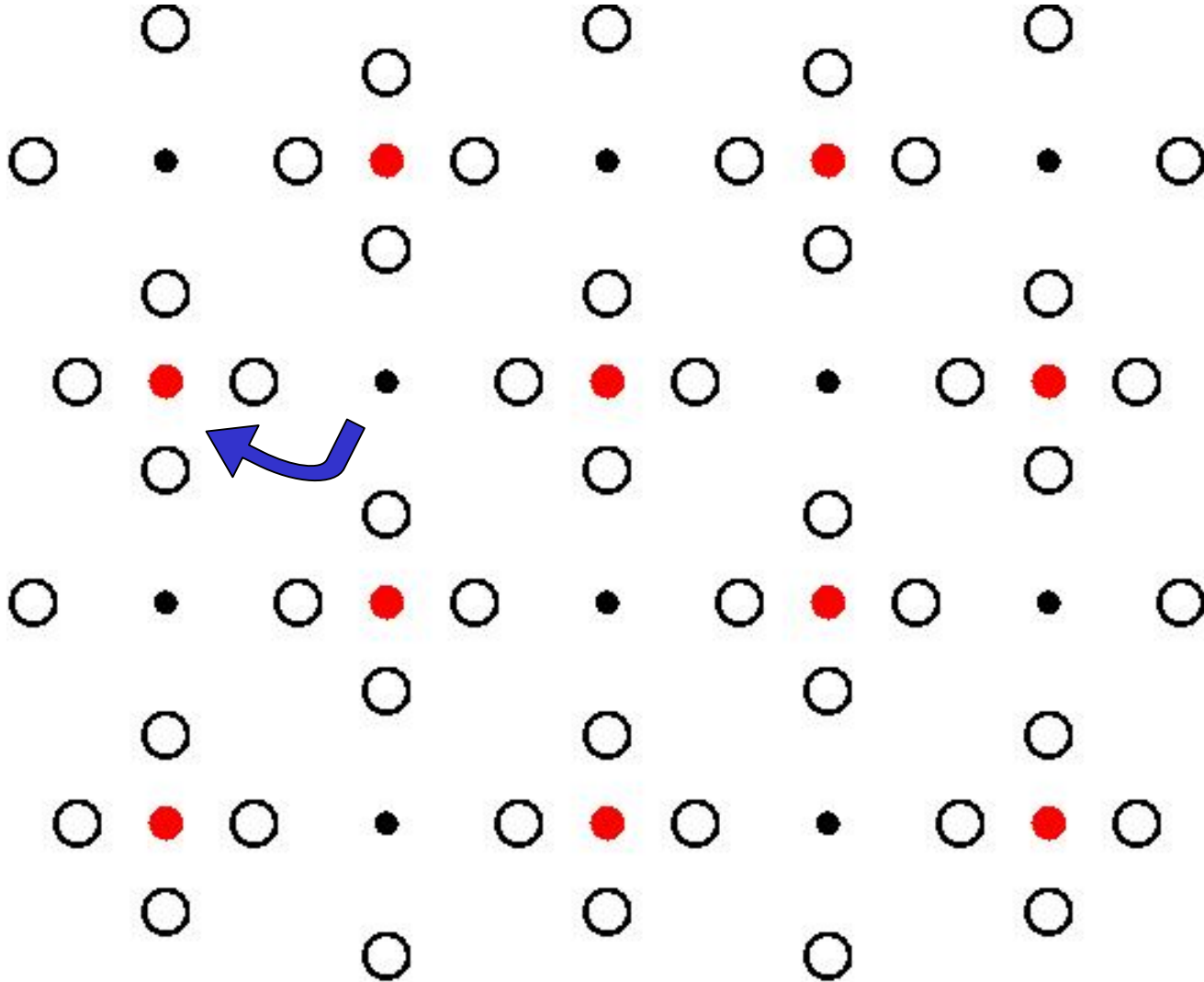
Bildung von Ladungen entlang der Bi-O-Bi-Bindungen

Over-Screening



Kopplung mit lokaler Ladungsfluktuation !

Over-Screening



Kopplung mit lokaler Ladungsfluktuation !

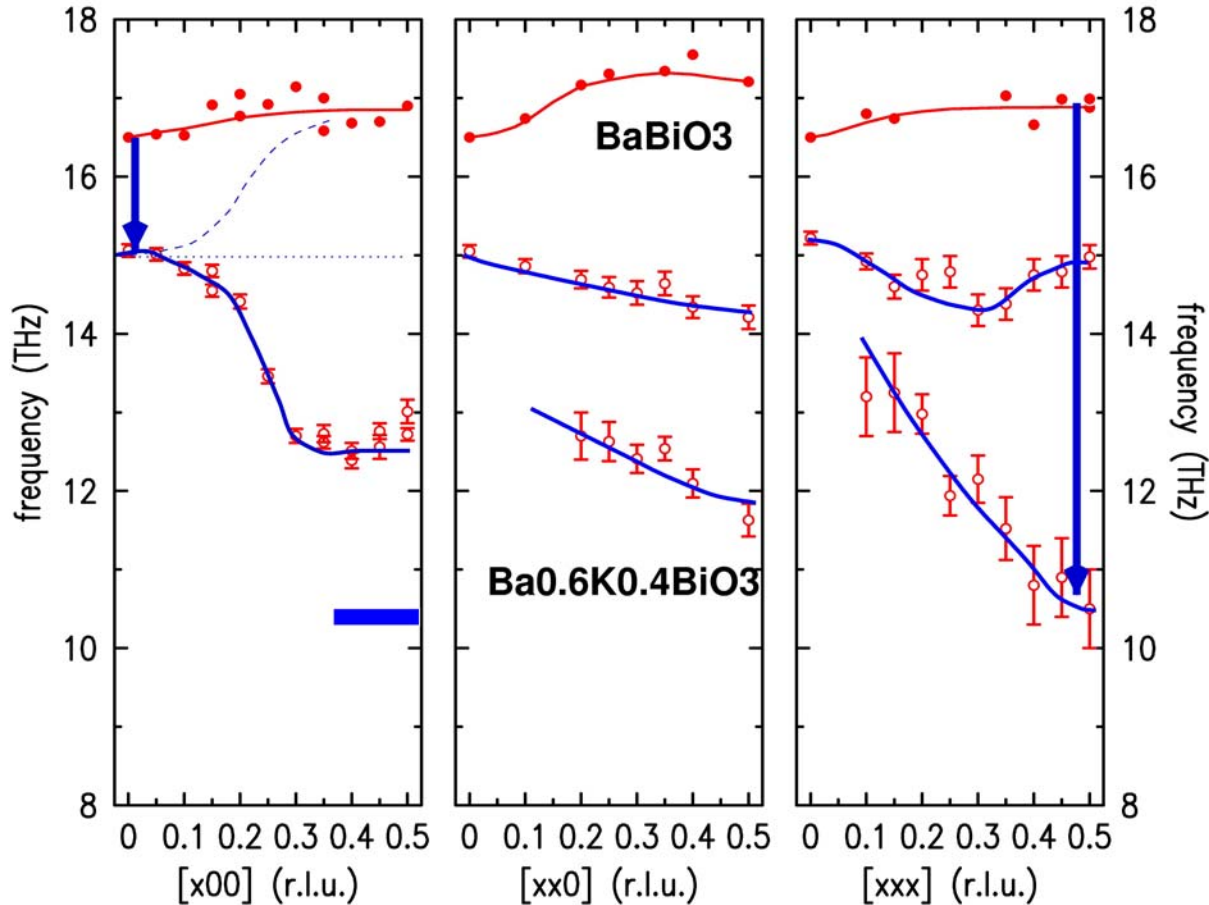
W. Weber., PRL58(1987)1371.

M. Tachiki et al., PRB38 (1988) 218.

C. Falter et al., PRB55 (1997) 3308.

Polaronen

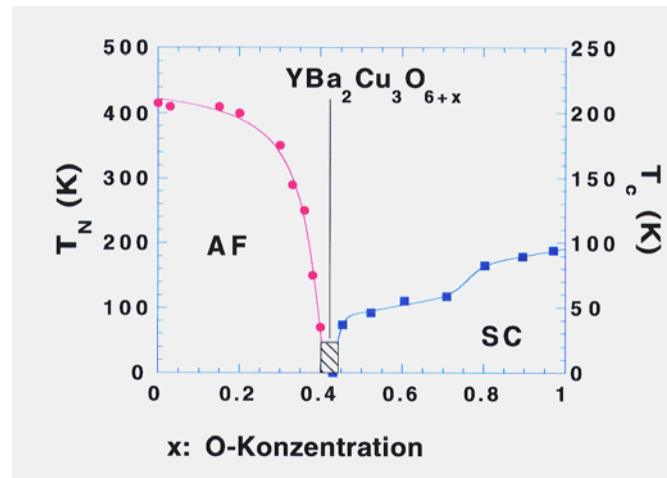
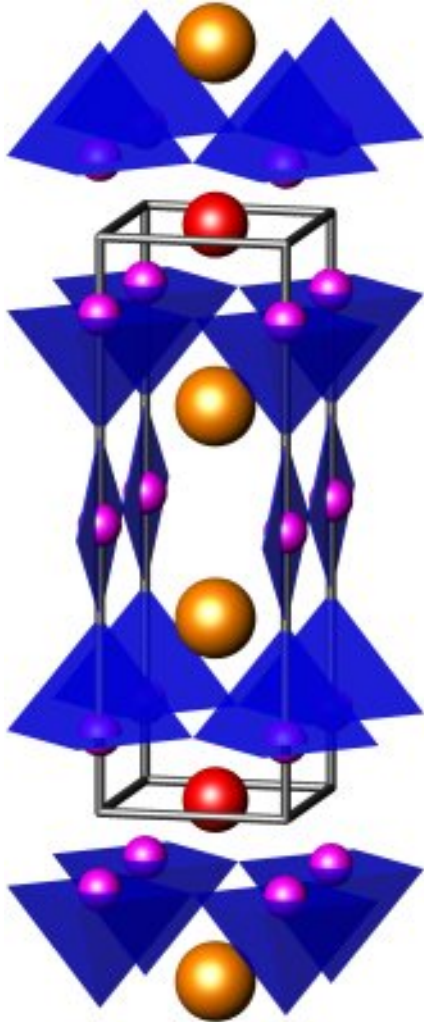
Dispersion der longitudinalen Bindungsstretschwingungen



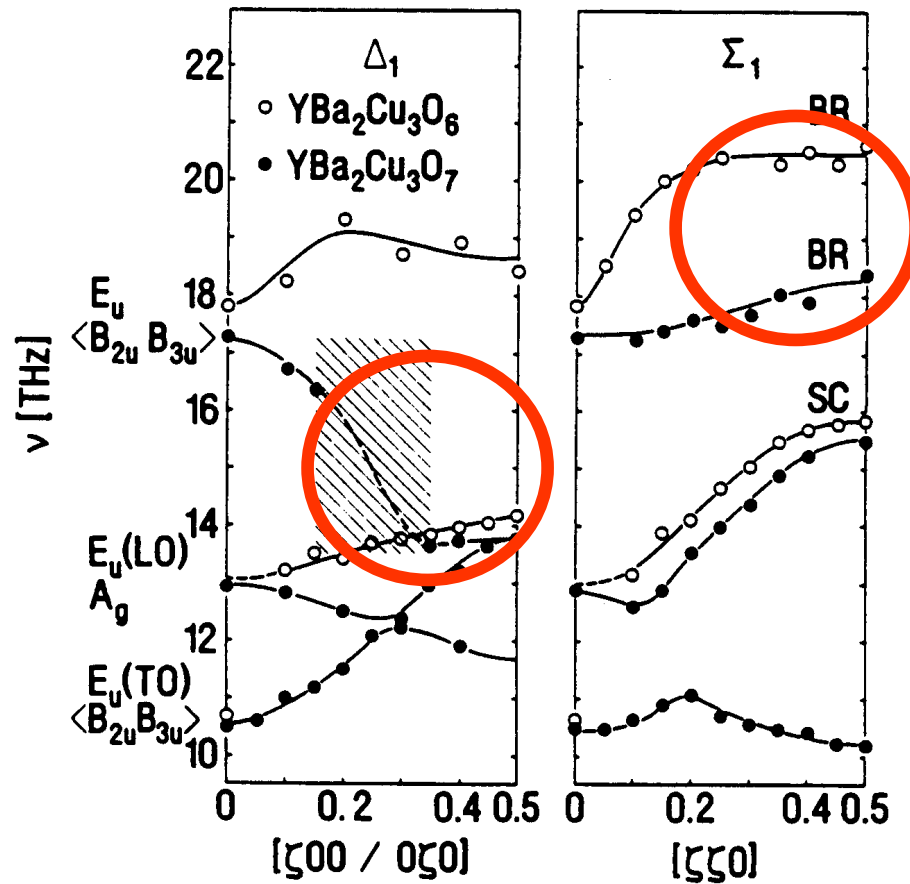
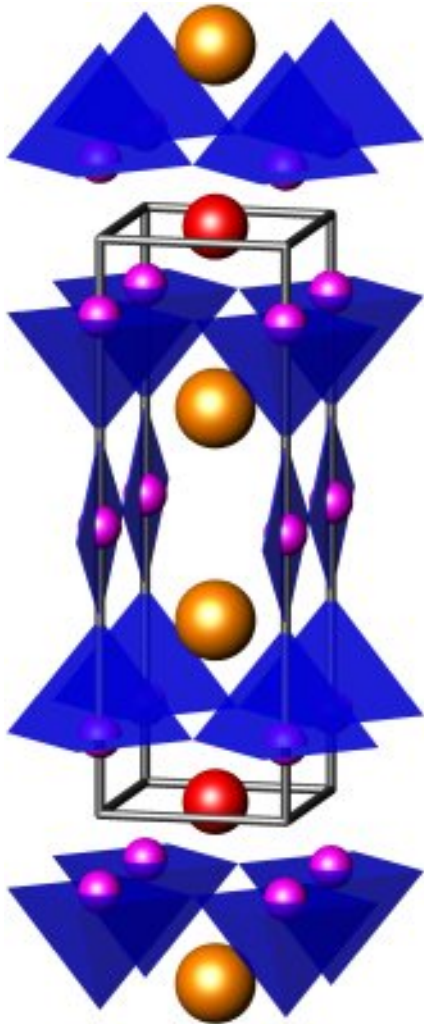
Braden et al.,
condmat0107498

**Dotierunggetriebene Renormierung von Frequenzen um >40% !
Inhomogene Ladungsverteilung**

$\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ $T_c=90\text{K}$



YBa₂Cu₃O₇ T_c=90K



W. Reichardt, J. of low Temp. Phys., 105, 8007 (1996).

auch : Petrov et al. cond-mat/0003414

McQueeney et al., cond-mat/0105593

Zusammenfassung Phononen

- zur Bestimmung einer Phononen-Dispersion bleibt die inelastische Neutronenstreuung die effizienteste Technik !
- Verbindungen von aktuellem Interesse (HTSC, Quasi-Kristalle, CMR-Manganate, heavy fermions, ...) :
in vielen Fällen ist die Gitterdynamik wichtig
- Materialien von aktuellem Interesse sind zunehmend komplex; Fortentwicklung der experimentellen und Analyse-Techniken ist sehr wichtig.